

6.1. Kristall- und Strukturdaten

6.1.1. $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{CH}_3\text{CN})_2]_n$

Bezeichnung	tecn_a	
Summenformel	$\text{C}_8\text{H}_6\text{N}_6\text{Te}$	
Molmasse	313.79 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	$P2_1$	
Zelldimensionen	$a = 6.006(1)$ Å	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 8.328(2)$ Å	$\beta = 92.10(1)^\circ$.
	$c = 11.976(2)$ Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$598.60(2)$ Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.741 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.464 mm ⁻¹	
F(000)	296	
Kristalldimensionen	0.40 x 0.31 x 0.03 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.70 bis 30.51°.	
Bereich der Indizes	$-8 \leq h \leq 8, -11 \leq k \leq 11, -17 \leq l \leq 14$	
Anzahl gemessene Reflexe	7471	
unabhängige Reflexe	3597 [R(int) = 0.0140]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.51°	99.3 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.361	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	3597 / 1 / 138	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.080	
Endgültiger Fehler R [$l > 2\sigma(l)$]	$R_1 = 0.0188, wR_2 = 0.0483$	
R (alle Daten)	$R_1 = 0.0193, wR_2 = 0.0488$	
Flack-Parameter	0.00(2)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.999 und -0.383 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{CH}_3\text{CN})_2]_n$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	4558(1)	9986(1)	3155(1)	26(1)
N(1)	5975(6)	12764(5)	1288(3)	53(1)
N(2)	6586(5)	7297(4)	1510(3)	45(1)
N(3)	9710(3)	10732(3)	3917(2)	39(1)
N(4)	4500(4)	12392(3)	4538(2)	41(1)
N(1L)	1536(3)	9954(7)	1399(2)	44(1)
N(2L)	1657(4)	7256(3)	3196(2)	43(1)
C(1)	5464(5)	11782(5)	1883(2)	34(1)
C(2)	5881(6)	8239(5)	2101(3)	35(1)
C(3)	7902(4)	10479(3)	3658(2)	31(1)
C(4)	5336(4)	8154(3)	4663(2)	35(1)
C(1L)	414(3)	9946(7)	616(2)	40(1)
C(2L)	-1008(4)	9951(11)	-392(2)	55(1)
C(3L)	568(4)	6158(3)	3309(2)	38(1)
C(4L)	-836(6)	4763(6)	3455(3)	54(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{CH}_3\text{CN})_2]_n$.

Te(1)-C(2)	2.102(4)
Te(1)-C(3)	2.116(2)
Te(1)-C(1)	2.217(4)
Te(1)-C(4)	2.397(2)
Te(1)-N(4)	2.601(2)
Te(1)-N(1L)	2.728(2)
Te(1)-N(2L)	2.866(2)
N(1)-C(1)	1.135(5)
N(2)-C(2)	1.147(5)
N(3)-C(3)	1.138(3)
N(4)-C(4)#1	1.149(3)
N(1L)-C(1L)	1.135(3)
N(2L)-C(3L)	1.135(4)
C(4)-N(4)#2	1.149(3)
C(1L)-C(2L)	1.453(3)
C(3L)-C(4L)	1.450(4)
C(2)-Te(1)-C(3)	85.95(11)
C(2)-Te(1)-C(1)	86.93(10)
C(3)-Te(1)-C(1)	79.07(9)
C(2)-Te(1)-C(4)	86.83(12)
C(3)-Te(1)-C(4)	75.64(9)
C(1)-Te(1)-C(4)	154.30(10)
C(2)-Te(1)-N(4)	158.47(11)
C(3)-Te(1)-N(4)	72.78(8)
C(1)-Te(1)-N(4)	85.81(12)
C(4)-Te(1)-N(4)	90.99(9)
C(2)-Te(1)-N(1L)	77.61(14)
C(3)-Te(1)-N(1L)	145.02(8)
C(1)-Te(1)-N(1L)	69.50(11)
C(4)-Te(1)-N(1L)	132.91(12)
N(4)-Te(1)-N(1L)	118.33(12)
C(2)-Te(1)-N(2L)	72.80(11)
C(3)-Te(1)-N(2L)	136.08(8)
C(1)-Te(1)-N(2L)	135.37(9)
C(4)-Te(1)-N(2L)	65.43(8)
N(4)-Te(1)-N(2L)	125.33(7)
N(1L)-Te(1)-N(2L)	67.53(11)
C(4)#1-N(4)-Te(1)	162.3(3)
C(1L)-N(1L)-Te(1)	174.70(17)
C(3L)-N(2L)-Te(1)	173.9(2)
N(1)-C(1)-Te(1)	175.5(3)
N(2)-C(2)-Te(1)	178.9(3)
N(3)-C(3)-Te(1)	179.1(2)
N(4)#2-C(4)-Te(1)	170.8(2)
N(1L)-C(1L)-C(2L)	179.4(6)
N(2L)-C(3L)-C(4L)	179.6(4)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,y+1/2,-z+1 #2 -x+1,y-1/2,-z+1

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{CH}_3\text{CN})_2]_n$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2 \pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	23(1)	28(1)	27(1)	0(1)	0(1)	-1(1)
N(1)	58(2)	52(2)	49(2)	14(1)	-6(1)	-13(2)
N(2)	45(1)	44(1)	47(1)	-8(1)	3(1)	3(1)
N(3)	29(1)	44(1)	46(1)	-5(1)	2(1)	-2(1)
N(4)	30(1)	45(1)	48(1)	-12(1)	2(1)	-1(1)
N(1L)	40(1)	54(1)	39(1)	5(2)	-3(1)	-8(2)
N(2L)	40(1)	44(1)	45(1)	2(1)	-4(1)	-8(1)
C(1)	34(2)	33(1)	33(2)	5(1)	-6(1)	-5(1)
C(2)	33(1)	40(1)	30(1)	-1(1)	-3(1)	-4(1)
C(3)	29(1)	33(1)	30(1)	0(1)	2(1)	0(1)
C(4)	30(1)	37(1)	38(1)	6(1)	-1(1)	-3(1)
C(1L)	36(1)	48(1)	35(1)	0(2)	2(1)	-9(2)
C(2L)	51(1)	81(2)	33(1)	3(3)	-6(1)	-13(3)
C(3L)	41(1)	39(1)	35(1)	-1(1)	-3(1)	-6(1)
C(4L)	66(2)	46(3)	49(1)	4(1)	-4(1)	-25(2)

6.1.2. $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{thf})_3]_n$

Bezeichnung	tecn4	
Summenformel	$\text{C}_{16} \text{H}_{24} \text{N}_4 \text{O}_3 \text{Te}$	
Molmasse	447.99 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/c$	
Zelldimensionen	$a = 8.473(2) \text{ \AA}$ $b = 11.030(3) \text{ \AA}$ $c = 20.505(6) \text{ \AA}$	$\alpha = 90^\circ$ $\beta = 92.63(1)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volumen	$1914.3(9) \text{ \AA}^3$	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.554 Mg/m^3	
Absorptionskoeffizient	1.574 mm^{-1}	
F(000)	896	
Kristalldimensionen	$0.3 \times 0.1 \times 0.03 \text{ mm}^3$	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.99 bis 27.56° .	
Bereich der Indizes	$-10 \leq h \leq 11$, $-14 \leq k \leq 13$, $-26 \leq l \leq 26$	
Anzahl gemessene Reflexe	18605	
unabhängige Reflexe	4405 [R(int) = 0.1175]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 27.56^\circ$	99.5 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.757	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F^2	
Reflexe / restraints / Parameter	4405 / 0 / 217	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.020	
Endgültiger Fehler R [$> 2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0593$, $wR_2 = 0.1368$	
R (alle Daten)	$R_1 = 0.1003$, $wR_2 = 0.1543$	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.555 und $-1.061 \text{ e.\AA}^{-3}$	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{thf})_3]_n$. $U(\text{eq})$ ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	5031(1)	5932(1)	3170(1)	28(1)
N(1)	6728(10)	4062(6)	4241(3)	58(2)
N(2)	6515(8)	7743(6)	4306(3)	50(2)
N(3)	8399(8)	5934(7)	2532(3)	53(2)
N(4)	5008(8)	3843(7)	2617(3)	48(2)
O(1L)	2591(7)	7347(5)	3609(3)	57(2)
O(2L)	2799(7)	4605(6)	3740(3)	63(2)
O(3L)	4246(8)	5944(5)	1871(2)	50(1)
C(1)	6135(9)	4674(6)	3861(3)	35(2)
C(2)	6032(8)	7139(6)	3903(3)	33(2)
C(3)	7241(8)	5952(6)	2761(3)	33(1)
C(4)	5065(8)	7961(7)	2645(3)	29(1)
C(1L)	1456(11)	7852(10)	3155(4)	67(3)
C(2L)	294(13)	8502(12)	3534(5)	81(3)
C(3L)	923(17)	8493(14)	4203(6)	113(5)
C(4L)	2220(13)	7675(12)	4234(4)	92(4)
C(5L)	1471(13)	4301(13)	3329(6)	106(5)
C(6L)	609(15)	3423(13)	3633(7)	102(4)
C(7L)	1105(17)	3491(18)	4327(7)	144(7)
C(8L)	2625(15)	4115(11)	4351(5)	84(3)
C(9L)	5182(14)	5982(15)	1348(4)	122(6)
C(10L)	4272(10)	5921(8)	745(4)	50(2)
C(11L)	2585(11)	5941(8)	928(3)	53(2)
C(12L)	2744(12)	6013(15)	1642(4)	122(6)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{thf})_3]_n$.

Te(1)-C(3)	2.086(7)
Te(1)-C(2)	2.153(6)
Te(1)-C(1)	2.164(6)
Te(1)-C(4)	2.484(7)
Te(1)-N(4)	2.567(8)
Te(1)-O(2L)	2.700(6)
Te(1)-O(3L)	2.716(5)
Te(1)-O(1L)	2.774(5)
N(1)-C(1)	1.131(9)
N(2)-C(2)	1.124(8)
N(3)-C(3)	1.108(9)
N(4)-C(4)#1	1.112(9)
O(1L)-C(4L)	1.382(10)
O(1L)-C(1L)	1.421(10)
O(2L)-C(8L)	1.379(11)
O(2L)-C(5L)	1.415(12)
O(3L)-C(12L)	1.338(11)
O(3L)-C(9L)	1.363(12)
C(4)-N(4)#2	1.112(9)
C(1L)-C(2L)	1.469(12)
C(2L)-C(3L)	1.448(15)
C(3L)-C(4L)	1.421(14)
C(5L)-C(6L)	1.379(15)
C(6L)-C(7L)	1.466(17)
C(7L)-C(8L)	1.459(17)

C(9L)-C(10L)	1.429(12)
C(10L)-C(11L)	1.495(12)
C(11L)-C(12L)	1.465(11)
C(3)-Te(1)-C(2)	86.6(3)
C(3)-Te(1)-C(1)	84.3(3)
C(2)-Te(1)-C(1)	78.2(2)
C(3)-Te(1)-C(4)	77.7(2)
C(2)-Te(1)-C(4)	74.5(2)
C(1)-Te(1)-C(4)	148.0(2)
C(3)-Te(1)-N(4)	79.7(2)
C(2)-Te(1)-N(4)	149.1(2)
C(1)-Te(1)-N(4)	73.1(2)
C(4)-Te(1)-N(4)	128.1(2)
C(3)-Te(1)-O(2L)	147.1(2)
C(2)-Te(1)-O(2L)	107.1(2)
C(1)-Te(1)-O(2L)	70.1(2)
C(4)-Te(1)-O(2L)	134.3(2)
N(4)-Te(1)-O(2L)	73.4(2)
C(3)-Te(1)-O(3L)	77.9(2)
C(2)-Te(1)-O(3L)	138.8(2)
C(1)-Te(1)-O(3L)	136.4(2)
C(4)-Te(1)-O(3L)	65.03(18)
N(4)-Te(1)-O(3L)	64.82(17)
O(2L)-Te(1)-O(3L)	106.41(19)
C(3)-Te(1)-O(1L)	145.1(2)
C(2)-Te(1)-O(1L)	72.6(2)
C(1)-Te(1)-O(1L)	117.0(2)
C(4)-Te(1)-O(1L)	69.9(2)
N(4)-Te(1)-O(1L)	131.1(2)
O(2L)-Te(1)-O(1L)	67.5(2)
O(3L)-Te(1)-O(1L)	99.36(17)
C(4)#1-N(4)-Te(1)	176.3(6)
C(4L)-O(1L)-C(1L)	109.2(7)
C(4L)-O(1L)-Te(1)	130.8(5)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	120.0(5)
C(8L)-O(2L)-C(5L)	109.5(7)
C(8L)-O(2L)-Te(1)	135.4(6)
C(5L)-O(2L)-Te(1)	115.1(5)
C(12L)-O(3L)-C(9L)	107.6(7)
C(12L)-O(3L)-Te(1)	122.0(5)
C(9L)-O(3L)-Te(1)	130.2(6)
N(1)-C(1)-Te(1)	176.8(6)
N(2)-C(2)-Te(1)	176.9(7)
N(3)-C(3)-Te(1)	177.7(7)
N(4)#2-C(4)-Te(1)	175.1(6)
O(1L)-C(1L)-C(2L)	107.1(7)
C(3L)-C(2L)-C(1L)	105.7(9)
C(4L)-C(3L)-C(2L)	107.2(9)
O(1L)-C(4L)-C(3L)	109.5(9)
C(6L)-C(5L)-O(2L)	108.7(9)
C(5L)-C(6L)-C(7L)	105.6(11)
C(8L)-C(7L)-C(6L)	105.7(9)
O(2L)-C(8L)-C(7L)	106.5(9)
O(3L)-C(9L)-C(10L)	111.6(9)
C(9L)-C(10L)-C(11L)	105.4(7)
C(12L)-C(11L)-C(10L)	102.0(7)
O(3L)-C(12L)-C(11L)	112.9(8)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $-x+1, y-1/2, -z+1/2$ #2 $-x+1, y+1/2, -z+1/2$

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot(\text{thf})_3]_n$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	30(1)	27(1)	25(1)	0(1)	-3(1)	0(1)
N(1)	82(5)	36(4)	54(4)	1(3)	-21(4)	6(4)
N(2)	65(4)	38(4)	47(4)	0(3)	-12(3)	-5(4)
N(3)	35(4)	66(5)	57(4)	-4(4)	2(3)	0(4)
N(4)	51(4)	52(5)	39(4)	5(3)	-1(3)	11(3)
O(1L)	59(4)	62(4)	52(3)	-15(3)	4(3)	25(3)
O(2L)	59(4)	71(4)	60(4)	33(3)	-6(3)	-19(3)
O(3L)	80(4)	42(3)	25(2)	-3(2)	-8(2)	10(3)
C(1)	51(4)	17(3)	34(3)	3(3)	-13(3)	-1(3)
C(2)	48(4)	22(3)	28(3)	-6(3)	-9(3)	3(3)
C(3)	29(3)	27(3)	43(4)	-4(3)	1(3)	1(3)
C(4)	39(4)	25(4)	22(3)	1(3)	-3(3)	2(3)
C(1L)	48(5)	95(8)	58(5)	-5(5)	-5(4)	10(5)
C(2L)	70(7)	121(10)	54(6)	10(6)	13(5)	33(7)
C(3L)	114(10)	147(12)	78(8)	-4(8)	26(7)	80(10)
C(4L)	90(8)	141(11)	44(5)	-3(6)	12(5)	57(8)
C(5L)	55(6)	169(14)	92(8)	75(9)	-14(6)	-36(7)
C(6L)	79(9)	109(11)	119(11)	13(9)	2(8)	-14(8)
C(7L)	91(10)	250(20)	93(10)	91(11)	-3(8)	-56(11)
C(8L)	95(8)	109(10)	48(5)	2(6)	5(5)	-21(7)
C(9L)	84(8)	256(19)	25(5)	7(7)	1(5)	33(10)
C(10L)	69(5)	48(5)	34(4)	3(4)	12(4)	1(5)
C(11L)	74(6)	52(5)	32(4)	-1(4)	-12(4)	-11(5)
C(12L)	53(6)	280(20)	36(5)	12(8)	-1(4)	-34(9)

6.1.3. $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\cdot\text{diglym}]_n$

Bezeichnung	sad	
Summenformel	$\text{C}_{10} \text{H}_{14} \text{N}_4 \text{O}_3 \text{Te}$	
Molmasse	365.85 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/n$	
Zelldimensionen	$a = 10.202(3) \text{ \AA}$ $b = 10.921(3) \text{ \AA}$ $c = 13.142(4) \text{ \AA}$	$\alpha = 90^\circ$ $\beta = 97.621(7)^\circ$ $\gamma = 90^\circ$
Volumen	$1451.3(8) \text{ \AA}^3$	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.674 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.056 mm ⁻¹	
F(000)	712	
Kristalldimensionen	0.10 x 0.05 x 0.02 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.38 bis 22.56°	
Bereich der Indizes	$-11 \leq h \leq 10, -11 \leq k \leq 11, -14 \leq l \leq 14$	
Anzahl gemessene Reflexe	9100	
unabhängige Reflexe	1901 [R(int) = 0.0930]	
Vollständigkeit zu Theta = 22.56°	99.8 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.756	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	

Reflexe / restraints / Parameter	1901 / 0 / 165
Goodness-of-fit gegen F^2	1.018
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0404, wR2 = 0.0792
R (alle Daten)	R1 = 0.0790, wR2 = 0.0969
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.887 und -0.697 e.Å ⁻³

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\text{-diglym}]_n$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	3629(1)	5765(1)	2330(1)	27(1)
N(1)	5042(10)	7731(9)	848(8)	69(3)
N(2)	6364(10)	4296(10)	2306(9)	86(4)
N(3)	2136(10)	4815(8)	146(7)	60(3)
N(4)	2090(7)	7782(8)	1968(6)	35(2)
O(1L)	5308(7)	6972(7)	3644(6)	62(2)
O(2L)	3237(7)	5751(8)	4403(5)	57(2)
O(3L)	1036(6)	5467(5)	2816(5)	35(2)
C(1)	4565(10)	7053(10)	1334(8)	45(3)
C(2)	5387(11)	4790(10)	2227(9)	47(3)
C(3)	2722(11)	5133(9)	909(9)	42(3)
C(4)	3145(9)	3745(10)	2772(7)	31(2)
C(1L)	6625(10)	7289(12)	3493(9)	65(4)
C(2L)	5065(11)	7090(11)	4653(8)	57(3)
C(3L)	3676(13)	6833(10)	4777(10)	69(4)
C(4L)	1950(10)	5418(10)	4580(8)	46(3)
C(5L)	881(9)	5913(10)	3811(7)	38(2)
C(6L)	-127(9)	5622(10)	2106(8)	51(3)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\text{-diglym}]_n$.

Te(1)-C(3)	2.088(11)
Te(1)-C(2)	2.106(12)
Te(1)-C(1)	2.221(11)
Te(1)-C(4)	2.350(11)
Te(1)-O(1L)	2.621(7)
Te(1)-N(4)	2.710(8)
Te(1)-O(2L)	2.805(7)
Te(1)-O(3L)	2.822(6)
N(1)-C(1)	1.130(12)
N(2)-C(2)	1.126(12)
N(3)-C(3)	1.151(12)
N(4)-C(4)#1	1.142(11)
O(1L)-C(2L)	1.387(12)
O(1L)-C(1L)	1.427(12)
O(2L)-C(3L)	1.334(12)
O(2L)-C(4L)	1.412(11)
O(3L)-C(6L)	1.419(10)
O(3L)-C(5L)	1.424(10)
C(4)-N(4)#2	1.142(11)
C(2L)-C(3L)	1.474(15)
C(4L)-C(5L)	1.487(13)
C(3)-Te(1)-C(2)	93.1(4)

C(3)-Te(1)-C(1)	81.8(4)
C(2)-Te(1)-C(1)	81.1(4)
C(3)-Te(1)-C(4)	80.1(3)
C(2)-Te(1)-C(4)	75.5(3)
C(1)-Te(1)-C(4)	149.4(3)
C(3)-Te(1)-O(1L)	158.3(3)
C(2)-Te(1)-O(1L)	79.0(4)
C(1)-Te(1)-O(1L)	77.0(3)
C(4)-Te(1)-O(1L)	116.7(3)
C(3)-Te(1)-N(4)	86.2(3)
C(2)-Te(1)-N(4)	151.5(3)
C(1)-Te(1)-N(4)	70.5(3)
C(4)-Te(1)-N(4)	132.1(3)
O(1L)-Te(1)-N(4)	91.1(3)
C(3)-Te(1)-O(2L)	139.8(3)
C(2)-Te(1)-O(2L)	107.0(3)
C(1)-Te(1)-O(2L)	134.7(3)
C(4)-Te(1)-O(2L)	72.1(3)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	61.8(2)
N(4)-Te(1)-O(2L)	91.2(2)
C(3)-Te(1)-O(3L)	81.2(3)
C(2)-Te(1)-O(3L)	142.0(3)
C(1)-Te(1)-O(3L)	134.1(3)
C(4)-Te(1)-O(3L)	66.5(2)
O(1L)-Te(1)-O(3L)	117.4(2)
N(4)-Te(1)-O(3L)	66.1(2)
O(2L)-Te(1)-O(3L)	61.39(18)
C(4)#1-N(4)-Te(1)	146.7(7)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	113.7(8)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	119.5(6)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	125.1(6)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	116.2(9)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	105.6(7)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	114.7(5)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	112.2(7)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	124.4(5)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	112.9(5)
N(1)-C(1)-Te(1)	178.1(10)
N(2)-C(2)-Te(1)	170.9(11)
N(3)-C(3)-Te(1)	175.0(10)
N(4)#2-C(4)-Te(1)	176.9(8)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	112.6(9)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	114.1(10)
O(2L)-C(4L)-C(5L)	114.1(8)
O(3L)-C(5L)-C(4L)	109.9(8)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $-x+1/2, y+1/2, -z+1/2$ #2 $-x+1/2, y-1/2, -z+1/2$

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_3(\mu\text{-CN})\text{-diglym}]_n$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	31(1)	22(1)	27(1)	1(1)	3(1)	1(1)
N(1)	75(7)	58(7)	79(8)	27(6)	33(6)	3(6)
N(2)	49(7)	69(8)	143(11)	22(8)	29(7)	15(7)
N(3)	89(8)	43(6)	45(6)	-6(5)	-6(6)	-9(5)
N(4)	37(5)	31(5)	40(5)	2(4)	16(4)	8(4)

O(1L)	65(5)	77(6)	46(5)	-15(4)	12(4)	-41(5)
O(2L)	46(4)	81(6)	46(4)	-23(5)	11(3)	-15(5)
O(3L)	30(4)	38(4)	37(4)	2(3)	6(3)	5(3)
C(1)	46(7)	43(7)	49(7)	7(6)	21(6)	9(6)
C(2)	40(7)	41(7)	60(8)	12(6)	6(6)	-7(6)
C(3)	54(7)	24(6)	47(7)	3(5)	4(6)	-2(5)
C(4)	32(6)	40(7)	24(5)	-7(5)	9(4)	-5(5)
C(1L)	46(7)	79(9)	66(8)	11(7)	-5(6)	-29(7)
C(2L)	67(8)	56(8)	42(7)	-20(6)	-13(6)	8(7)
C(3L)	101(11)	36(7)	79(10)	-18(7)	45(8)	-28(7)
C(4L)	49(7)	58(8)	35(6)	1(5)	15(5)	8(6)
C(5L)	38(6)	40(6)	39(6)	3(5)	14(5)	-3(5)
C(6L)	28(6)	55(8)	68(8)	8(7)	6(5)	0(6)

6.1.4. Te(CN)₄·(diglym)₂

Bezeichnung	C2c	
Summenformel	C ₁₆ H ₂₆ N ₄ O ₆ Te	
Molmasse	500.02 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	C2/c	
Zelldimensionen	a = 17.596(5) Å	α = 90°.
	b = 7.664(5) Å	β = 115.66(1)°.
	c = 18.360(5) Å	γ = 90°.
Volumen	2231.8(2) Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.488 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.368 mm ⁻¹	
F(000)	1008	
Kristalldimensionen	0.33 x 0.24 x 0.05 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.46 bis 30.52°.	
Bereich der Indizes	-21 ≤ h ≤ 25, -10 ≤ k ≤ 10, -26 ≤ l ≤ 25	
Anzahl gemessene Reflexe	13443	
unabhängige Reflexe	3364 [R(int) = 0.0143]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.52°	98.7 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.775	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	3364 / 0 / 123	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.079	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0145, wR ₂ = 0.0359	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0165, wR ₂ = 0.0370	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.419 und -0.347 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)
für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{diglym})_2$. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	0	1425(1)	7500	21(1)
N(1)	-2081(1)	324(2)	6740(1)	46(1)
N(2)	91(1)	-1504(1)	8808(1)	44(1)
C(1)	-1387(1)	676(2)	6972(1)	30(1)
C(2)	48(1)	-497(1)	8335(1)	30(1)
O(1L)	-1213(1)	2644(1)	5542(1)	40(1)
O(2L)	-1182(1)	4654(1)	6842(1)	32(1)
O(3L)	-699(1)	2873(1)	8388(1)	28(1)
C(1L)	-901(1)	2247(2)	4966(1)	47(1)
C(2L)	-1522(1)	4382(2)	5438(1)	43(1)
C(3L)	-1851(1)	4762(2)	6048(1)	44(1)
C(4L)	-1455(1)	5186(2)	7437(1)	37(1)
C(5L)	-778(1)	4723(2)	8254(1)	34(1)
C(6L)	-1298(1)	2184(2)	8643(1)	38(1)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{diglym})_2$.

Te(1)-C(2)#1	2.101(2)
Te(1)-C(2)	2.101(2)
Te(1)-C(1)	2.275(2)
Te(1)-C(1)#1	2.275(2)
Te(1)-O(3L)	2.671(9)
Te(1)-O(2L)	3.120(2)
Te(1)-O(1L)	3.422(2)
N(1)-C(1)	1.138(17)
N(2)-C(2)	1.1397(16)
O(1L)-C(1L)	1.4195(17)
O(1L)-C(2L)	1.420(2)
O(2L)-C(3L)	1.4251(16)
O(2L)-C(4L)	1.4289(16)
O(3L)-C(6L)	1.4288(15)
O(3L)-C(5L)	1.4351(17)
C(2L)-C(3L)	1.495(2)
C(4L)-C(5L)	1.4993(19)
C(2)#1-Te(1)-C(2)	90.93(7)
C(2)#1-Te(1)-C(1)	79.32(5)
C(2)-Te(1)-C(1)	80.28(5)
C(2)#1-Te(1)-C(1)#1	80.28(5)
C(2)-Te(1)-C(1)#1	79.32(5)
C(1)-Te(1)-C(1)#1	150.74(7)
C(2)#1-Te(1)-O(3L)	148.49(4)
C(2)-Te(1)-O(3L)	74.36(5)
C(1)-Te(1)-O(3L)	70.92(4)
C(1)#1-Te(1)-O(3L)	122.47(4)
C(2)#1-Te(1)-O(2L)	117.67(5)
C(2)-Te(1)-O(2L)	130.41(4)
C(1)-Te(1)-O(2L)	67.85(5)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)	141.05(4)
O(3L)-Te(1)-O(2L)	60.04(3)
C(2)#1-Te(1)-O(1L)	67.37(5)

C(2)-Te(1)-O(1L)	140.14(4)
C(1)-Te(1)-O(1L)	63.57(3)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)	125.66(3)
O(3L)-Te(1)-O(1L)	106.57(3)
O(2L)-Te(1)-O(1L)	50.86(2)
N(1)-C(1)-Te(1)	176.81(11)
N(2)-C(2)-Te(1)	177.69(12)
C(1L)-O(1L)-C(2L)	110.50(11)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	117.24(8)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	115.14(7)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	111.29(10)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	123.97(8)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	108.61(7)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	112.93(9)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	130.34(8)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	110.08(7)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	109.42(11)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	109.82(11)
O(2L)-C(4L)-C(5L)	108.24(10)
O(3L)-C(5L)-C(4L)	112.42(10)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x,y,-z+3/2

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{diglym})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	22(1)	17(1)	25(1)	0	12(1)	0
N(1)	35(1)	62(1)	39(1)	-1(1)	14(1)	-18(1)
N(2)	66(1)	29(1)	43(1)	5(1)	29(1)	-2(1)
C(1)	32(1)	30(1)	30(1)	-2(1)	14(1)	-7(1)
C(2)	37(1)	22(1)	33(1)	0(1)	18(1)	-1(1)
O(1L)	40(1)	46(1)	36(1)	9(1)	19(1)	1(1)
O(2L)	25(1)	36(1)	34(1)	6(1)	11(1)	5(1)
O(3L)	26(1)	30(1)	30(1)	-2(1)	14(1)	1(1)
C(1L)	47(1)	65(1)	29(1)	4(1)	16(1)	-2(1)
C(2L)	40(1)	46(1)	32(1)	11(1)	6(1)	-1(1)
C(3L)	30(1)	49(1)	42(1)	9(1)	5(1)	10(1)
C(4L)	32(1)	32(1)	50(1)	3(1)	21(1)	10(1)
C(5L)	36(1)	29(1)	38(1)	-9(1)	18(1)	-1(1)
C(6L)	36(1)	45(1)	42(1)	1(1)	26(1)	0(1)

Torsionswinkel [$^\circ$] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{diglym})_2$.

C(2)#1-Te(1)-C(1)-N(1)	153(2)
C(2)-Te(1)-C(1)-N(1)	60(2)
C(1)#1-Te(1)-C(1)-N(1)	106(2)
O(3L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-17(2)
O(2L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-81(2)
O(1L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-137(2)
C(2)#1-Te(1)-C(2)-N(2)	146(3)
C(1)-Te(1)-C(2)-N(2)	-135(3)
C(1)#1-Te(1)-C(2)-N(2)	66(3)
O(3L)-Te(1)-C(2)-N(2)	-62(3)

O(2L)-Te(1)-C(2)-N(2)	-85(3)
O(1L)-Te(1)-C(2)-N(2)	-159(3)
C(2)#1-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-41.89(10)
C(2)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-103.73(11)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-130.92(11)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(1L)	16.49(11)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	171.00(10)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	147.04(11)
C(2)#1-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-174.48(9)
C(2)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	123.68(10)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	96.49(10)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-116.10(9)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	38.41(9)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	14.45(8)
C(2)#1-Te(1)-O(2L)-C(3L)	11.55(10)
C(2)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-106.51(10)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-52.39(10)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(3L)	121.74(10)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-132.44(10)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	20.86(9)
C(2)#1-Te(1)-O(2L)-C(4L)	145.09(8)
C(2)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	27.02(9)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	81.15(8)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-104.72(9)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	1.10(7)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	154.39(9)
C(2)#1-Te(1)-O(3L)-C(6L)	20.22(13)
C(2)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-44.67(10)
C(1)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	40.24(10)
C(1)#1-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-110.70(10)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	115.11(11)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	93.78(10)
C(2)#1-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-128.49(9)
C(2)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	166.63(8)
C(1)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-108.46(8)
C(1)#1-Te(1)-O(3L)-C(5L)	100.60(8)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-33.60(7)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-54.92(7)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	179.68(12)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-44.66(13)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	173.96(11)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-53.54(14)
O(1L)-C(2L)-C(3L)-O(2L)	63.04(15)
C(3L)-O(2L)-C(4L)-C(5L)	169.45(11)
Te(1)-O(2L)-C(4L)-C(5L)	29.63(11)
C(6L)-O(3L)-C(5L)-C(4L)	-82.48(13)
Te(1)-O(3L)-C(5L)-C(4L)	72.06(10)
O(2L)-C(4L)-C(5L)-O(3L)	-69.22(13)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x,y,-z+3/2

6.1.5. Te(CN)₄·(dme)₂

Bezeichnung	tecndm	
Summenformel	C ₁₂ H ₂₀ N ₄ O ₄ Te	
Molmasse	411.92 g/mol	
Messtemperatur	133 K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 7.488(3) Å	α = 100.33(2)°
	b = 8.616(4) Å	β = 95.78(2)°
	c = 15.627(7) Å	γ = 111.86(2)°
Volumen	904.9(7) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.512 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.662 mm ⁻¹	
F(000)	408	
Kristalldimensionen	0.5 x 0.29 x 0.29 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.35 bis 30.53°	
Bereich der Indizes	-10 ≤ h ≤ 10, -12 ≤ k ≤ 11, -22 ≤ l ≤ 18	
Anzahl gemessene Reflexe	11291	
unabhängige Reflexe	5362 [R(int) = 0.0118]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.53°	96.8 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.00 und 0.859	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	5362 / 0 / 190	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.104	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0158, wR ₂ = 0.0404	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0166, wR ₂ = 0.0408	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.359 und -1.099 e·Å ⁻³	

Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å²x 10³) für Te(CN)₄·(dme)₂. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	9155(1)	8606(1)	7518(1)	15(1)
N(1)	5924(2)	4591(2)	6387(1)	30(1)
N(2)	13797(2)	11497(2)	8585(1)	31(1)
N(3)	11158(2)	6218(2)	8278(1)	33(1)
N(4)	11102(2)	8466(2)	5760(1)	36(1)
O(1L)	8592(2)	10928(1)	8914(1)	25(1)
O(2L)	7221(1)	7387(1)	8805(1)	22(1)
O(3L)	9897(1)	11645(1)	6978(1)	23(1)
O(4L)	6298(1)	8881(1)	6477(1)	24(1)
C(1)	7020(2)	5947(2)	6750(1)	21(1)
C(2)	12286(2)	10562(2)	8187(1)	21(1)
C(3)	10460(2)	7045(2)	7998(1)	21(1)
C(4)	10447(2)	8478(2)	6389(1)	23(1)
C(1L)	9705(3)	12739(2)	9226(1)	34(1)
C(2L)	7543(2)	10202(2)	9552(1)	27(1)
C(3L)	6147(2)	8385(2)	9124(1)	30(1)
C(4L)	6114(2)	5577(2)	8721(1)	29(1)
C(5L)	11651(2)	12676(2)	6712(1)	28(1)
C(6L)	8252(2)	11914(2)	6585(1)	27(1)
C(7L)	6423(2)	10607(2)	6773(1)	26(1)
C(8L)	5732(2)	8219(2)	5531(1)	32(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Te(1)-C(4)	2.101(2)
Te(1)-C(3)	2.125(2)
Te(1)-C(1)	2.269(2)
Te(1)-C(2)	2.315(2)
Te(1)-O(4L)	2.664(2)
Te(1)-O(2L)	2.731(2)
Te(1)-O(3L)	2.771(2)
Te(1)-O(1L)	2.862(2)
N(1)-C(1)	1.147(2)
N(2)-C(2)	1.147(2)
N(3)-C(3)	1.147(2)
N(4)-C(4)	1.142(2)
O(1L)-C(2L)	1.420(2)
O(1L)-C(1L)	1.429(2)
O(2L)-C(3L)	1.441(2)
O(2L)-C(4L)	1.442(2)
O(3L)-C(6L)	1.436(2)
O(3L)-C(5L)	1.436(2)
O(4L)-C(7L)	1.441(2)
O(4L)-C(8L)	1.444(2)
C(2L)-C(3L)	1.502(2)
C(6L)-C(7L)	1.510(2)
C(4)-Te(1)-C(3)	90.21(6)
C(4)-Te(1)-C(1)	81.94(6)
C(3)-Te(1)-C(1)	79.10(6)
C(4)-Te(1)-C(2)	83.00(6)
C(3)-Te(1)-C(2)	76.93(6)
C(1)-Te(1)-C(2)	151.53(4)
C(4)-Te(1)-O(4L)	85.68(5)
C(3)-Te(1)-O(4L)	149.69(4)
C(1)-Te(1)-O(4L)	70.59(5)
C(2)-Te(1)-O(4L)	131.99(5)
C(4)-Te(1)-O(2L)	156.48(4)
C(3)-Te(1)-O(2L)	72.97(5)
C(1)-Te(1)-O(2L)	78.86(5)
C(2)-Te(1)-O(2L)	108.15(5)
O(4L)-Te(1)-O(2L)	100.49(4)
C(4)-Te(1)-O(3L)	71.88(5)
C(3)-Te(1)-O(3L)	144.59(4)
C(1)-Te(1)-O(3L)	125.99(5)
C(2)-Te(1)-O(3L)	70.87(4)
O(4L)-Te(1)-O(3L)	61.27(3)
O(2L)-Te(1)-O(3L)	130.97(3)
C(4)-Te(1)-O(1L)	143.42(5)
C(3)-Te(1)-O(1L)	112.54(5)
C(1)-Te(1)-O(1L)	128.82(5)
C(2)-Te(1)-O(1L)	75.33(5)
O(4L)-Te(1)-O(1L)	87.36(4)
O(2L)-Te(1)-O(1L)	60.01(4)
O(3L)-Te(1)-O(1L)	73.30(4)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	112.13(11)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	116.99(8)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	127.80(9)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	111.20(11)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	111.35(9)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	122.16(8)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	110.35(11)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	117.68(8)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	127.25(8)

C(7L)-O(4L)-C(8L)	113.88(11)
C(7L)-O(4L)-Te(1)	106.74(7)
C(8L)-O(4L)-Te(1)	126.14(8)
N(1)-C(1)-Te(1)	177.77(12)
N(2)-C(2)-Te(1)	174.16(12)
N(3)-C(3)-Te(1)	178.26(13)
N(4)-C(4)-Te(1)	176.17(13)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	108.86(12)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	109.77(11)
O(3L)-C(6L)-C(7L)	107.79(11)
O(4L)-C(7L)-C(6L)	111.39(11)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	14(1)	15(1)	14(1)	3(1)	2(1)	5(1)
N(1)	28(1)	25(1)	30(1)	3(1)	1(1)	6(1)
N(2)	25(1)	28(1)	32(1)	8(1)	-1(1)	4(1)
N(3)	26(1)	26(1)	45(1)	12(1)	0(1)	10(1)
N(4)	34(1)	44(1)	28(1)	6(1)	13(1)	14(1)
O(1L)	32(1)	20(1)	21(1)	3(1)	8(1)	8(1)
O(2L)	22(1)	19(1)	24(1)	6(1)	8(1)	5(1)
O(3L)	20(1)	25(1)	28(1)	11(1)	4(1)	10(1)
O(4L)	24(1)	24(1)	21(1)	4(1)	-2(1)	10(1)
C(1)	20(1)	21(1)	21(1)	4(1)	2(1)	8(1)
C(2)	21(1)	20(1)	22(1)	7(1)	3(1)	7(1)
C(3)	18(1)	19(1)	25(1)	5(1)	1(1)	6(1)
C(4)	21(1)	24(1)	22(1)	4(1)	4(1)	7(1)
C(1L)	45(1)	20(1)	33(1)	3(1)	6(1)	11(1)
C(2L)	29(1)	28(1)	26(1)	3(1)	12(1)	12(1)
C(3L)	20(1)	31(1)	38(1)	5(1)	11(1)	9(1)
C(4L)	32(1)	22(1)	28(1)	7(1)	6(1)	2(1)
C(5L)	26(1)	25(1)	31(1)	11(1)	6(1)	6(1)
C(6L)	27(1)	27(1)	31(1)	11(1)	2(1)	14(1)
C(7L)	24(1)	29(1)	28(1)	6(1)	3(1)	15(1)
C(8L)	35(1)	39(1)	22(1)	4(1)	-4(1)	18(1)

Torsionswinkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot (\text{dme})_2$.

C(4)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-178.29(9)
C(3)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-53.85(10)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	40.23(11)
C(2)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-122.64(10)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	102.58(9)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-1.12(8)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	163.33(9)
C(4)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-19.86(14)
C(3)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	104.59(12)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-161.33(11)
C(2)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	35.80(11)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-98.98(12)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	157.32(12)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-38.23(11)
C(4)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-151.98(11)

C(3)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	162.01(9)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-116.11(9)
C(2)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	92.46(9)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-48.50(9)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	12.37(10)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	32.25(8)
C(4)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-17.21(15)
C(3)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-63.22(10)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	18.66(10)
C(2)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-132.77(10)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	86.27(10)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	147.14(9)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	167.02(10)
C(4)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	108.35(10)
C(3)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	171.37(9)
C(1)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	43.17(10)
C(2)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-162.93(10)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	13.24(9)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-65.15(10)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-83.05(9)
C(4)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-44.80(11)
C(3)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	18.23(14)
C(1)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-109.97(11)
C(2)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	43.93(11)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-139.90(11)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	141.71(10)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	123.80(11)
C(4)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-110.96(9)
C(3)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	166.06(9)
C(1)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	166.07(9)
C(2)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-34.41(10)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	91.95(8)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-39.27(8)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	33.10(8)
C(4)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	27.03(12)
C(3)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-55.95(15)
C(1)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-55.94(12)
C(2)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	103.58(12)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-130.07(11)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	98.72(12)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	171.09(11)
C(4)-Te(1)-C(1)-N(1)	159(3)
C(3)-Te(1)-C(1)-N(1)	67(3)
C(2)-Te(1)-C(1)-N(1)	100(3)
O(4L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-113(3)
O(2L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-7(3)
O(3L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-140(3)
O(1L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-43(3)
C(4)-Te(1)-C(2)-N(2)	-155.0(12)
C(3)-Te(1)-C(2)-N(2)	-63.2(12)
C(1)-Te(1)-C(2)-N(2)	-96.6(12)
O(4L)-Te(1)-C(2)-N(2)	127.2(11)
O(2L)-Te(1)-C(2)-N(2)	3.7(12)
O(3L)-Te(1)-C(2)-N(2)	131.7(12)
O(1L)-Te(1)-C(2)-N(2)	54.7(12)
C(4)-Te(1)-C(3)-N(3)	159(4)
C(1)-Te(1)-C(3)-N(3)	-120(4)
C(2)-Te(1)-C(3)-N(3)	76(4)
O(4L)-Te(1)-C(3)-N(3)	-120(4)
O(2L)-Te(1)-C(3)-N(3)	-38(4)
O(3L)-Te(1)-C(3)-N(3)	101(4)
O(1L)-Te(1)-C(3)-N(3)	8(4)

C(3)-Te(1)-C(4)-N(4)	-179(100)
C(1)-Te(1)-C(4)-N(4)	102.0(19)
C(2)-Te(1)-C(4)-N(4)	-102.2(19)
O(4L)-Te(1)-C(4)-N(4)	31.0(19)
O(2L)-Te(1)-C(4)-N(4)	137.5(19)
O(3L)-Te(1)-C(4)-N(4)	-30.1(19)
O(1L)-Te(1)-C(4)-N(4)	-49(2)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	170.06(12)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-28.21(13)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	156.89(12)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-63.24(13)
O(1L)-C(2L)-C(3L)-O(2L)	60.37(16)
C(5L)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	171.50(11)
Te(1)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	14.06(14)
C(8L)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	-75.53(14)
Te(1)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	68.23(12)
O(3L)-C(6L)-C(7L)-O(4L)	-54.80(15)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

6.1.6. Te(CN)₄·18-Krone-6·CH₃CN

Bezeichnung	pmn21a	
Summenformel	C ₁₈ H ₂₇ N ₅ O ₆ Te	
Molmasse	537.05 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	orthorhombisch	
Raumgruppe	Pmn2 ₁	
Zelldimensionen	a = 11.983(2) Å	α = 90°.
	b = 12.490(2) Å	β = 90°.
	c = 7.618(2) Å	γ = 90°.
Volumen	1140.1(3) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.564 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.347 mm ⁻¹	
F(000)	540	
Kristalldimensionen	0.33 x 0.23 x 0.20 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.63 bis 30.53°.	
Bereich der Indizes	-16 ≤ h ≤ 17, -17 ≤ k ≤ 17, -10 ≤ l ≤ 10	
Anzahl gemessene Reflexe	16890	
unabhängige Reflexe	3424 [R(int) = 0.0134]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.53°	100.0 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.860	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	3424 / 1 / 152	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.132	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0138, wR2 = 0.0329	
R (alle Daten)	R1 = 0.0159, wR2 = 0.0353	
Flack-Parameter	-0.004(13)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.734 und -0.241 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot 18\text{-Krone-6} \cdot \text{CH}_3\text{CN}$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	5000	2555(1)	3705(1)	21(1)
C(1)	5000	828(2)	4623(3)	26(1)
C(2)	5000	4296(2)	4551(3)	29(1)
C(3)	3742(1)	2568(1)	5631(2)	28(1)
C(1K)	4024(1)	4828(1)	531(3)	47(1)
C(2K)	3032(2)	4126(2)	623(3)	49(1)
C(3K)	1996(1)	2989(1)	2487(3)	34(1)
C(4K)	2072(1)	1931(1)	1570(3)	35(1)
C(5K)	3160(1)	360(1)	1357(3)	40(1)
C(6K)	3991(1)	526(1)	-61(2)	41(1)
C(1L)	5000	7752(2)	1323(4)	36(1)
C(2L)	5000	7550(2)	3170(5)	56(1)
N(1)	5000	-14(2)	5205(3)	36(1)
N(2)	5000	5146(2)	5100(3)	42(1)
N(3)	3059(1)	2573(1)	6677(2)	41(1)
N(1L)	5000	7908(2)	-145(4)	57(1)
O(1K)	5000	4191(1)	668(2)	37(1)
O(2K)	2990(1)	3614(1)	2305(1)	31(1)
O(3K)	2959(1)	1327(1)	2336(1)	33(1)
O(4K)	5000	851(2)	743(3)	55(1)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot 18\text{-Krone-6} \cdot \text{CH}_3\text{CN}$

Te(1)-C(3)#1	2.1037(16)
Te(1)-C(3)	2.1037(16)
Te(1)-C(2)	2.2678(19)
Te(1)-C(1)	2.2679(19)
Te(1)-O(2K)	2.947(1)
Te(1)-O(3K)	3.070(2)
Te(1)-O(1K)	3.086(2)
Te(1)-O(4K)	3.102(2)
C(1)-N(1)	1.142(3)
C(2)-N(2)	1.141(3)
C(3)-N(3)	1.142(2)
C(1K)-O(1K)	1.418(2)
C(1K)-C(2K)	1.479(2)
C(2K)-O(2K)	1.433(2)
C(3K)-O(2K)	1.431(2)
C(3K)-C(4K)	1.498(2)
C(4K)-O(3K)	1.429(2)
C(5K)-O(3K)	1.439(2)
C(5K)-C(6K)	1.483(2)
C(6K)-O(4K)	1.415(2)
C(1L)-N(1L)	1.135(4)
C(1L)-C(2L)	1.429(5)
O(1K)-C(1K)#1	1.418(2)
O(4K)-C(6K)#1	1.415(2)
C(3)#1-Te(1)-C(3)	91.56(9)
C(3)#1-Te(1)-C(2)	78.14(5)
C(3)-Te(1)-C(2)	78.14(5)
C(3)#1-Te(1)-C(1)	78.00(5)
C(3)-Te(1)-C(1)	78.00(5)

C(2)-Te(1)-C(1)	145.51(8)
C(3)#1-Te(1)-O(2K)	146.56(4)
C(3)-Te(1)-O(2K)	70.31(5)
C(2)-Te(1)-O(2K)	70.89(3)
C(1)-Te(1)-O(2K)	122.57(2)
C(3)#1-Te(1)-O(3K)	144.25(4)
C(3)-Te(1)-O(3K)	70.72(5)
C(2)-Te(1)-O(3K)	125.17(2)
C(1)-Te(1)-O(3K)	68.23(3)
O(2K)-Te(1)-O(3K)	56.67(3)
C(3)#1-Te(1)-O(1K)	121.17(4)
C(3)-Te(1)-O(1K)	121.17(4)
C(2)-Te(1)-O(1K)	65.06(6)
C(1)-Te(1)-O(1K)	149.43(6)
O(2K)-Te(1)-O(1K)	55.38(2)
O(3K)-Te(1)-O(1K)	94.38(3)
C(3)#1-Te(1)-O(4K)	120.83(4)
C(3)-Te(1)-O(4K)	120.83(4)
C(2)-Te(1)-O(4K)	149.86(7)
C(1)-Te(1)-O(4K)	64.63(7)
O(2K)-Te(1)-O(4K)	92.57(3)
O(3K)-Te(1)-O(4K)	53.82(2)
O(1K)-Te(1)-O(4K)	84.79(7)
N(1)-C(1)-Te(1)	175.13(18)
N(2)-C(2)-Te(1)	175.0(2)
N(3)-C(3)-Te(1)	179.85(12)
O(1K)-C(1K)-C(2K)	109.10(14)
O(2K)-C(2K)-C(1K)	109.57(14)
O(2K)-C(3K)-C(4K)	112.72(12)
O(3K)-C(4K)-C(3K)	108.72(12)
O(3K)-C(5K)-C(6K)	111.85(13)
O(4K)-C(6K)-C(5K)	107.36(15)
N(1L)-C(1L)-C(2L)	179.7(3)
C(1K)#1-O(1K)-C(1K)	111.13(17)
C(1K)#1-O(1K)-Te(1)	115.23(10)
C(1K)-O(1K)-Te(1)	115.23(10)
C(3K)-O(2K)-C(2K)	111.06(13)
C(3K)-O(2K)-Te(1)	113.59(8)
C(2K)-O(2K)-Te(1)	119.64(10)
C(4K)-O(3K)-C(5K)	110.86(13)
C(4K)-O(3K)-Te(1)	117.87(8)
C(5K)-O(3K)-Te(1)	117.55(8)
C(6K)-O(4K)-C(6K)#1	117.44(18)
C(6K)-O(4K)-Te(1)	120.77(9)
C(6K)#1-O(4K)-Te(1)	120.77(9)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:
#1 -x+1,y,z

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot 18\text{-Krone-6} \cdot \text{CH}_3\text{CN}$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	27(1)	19(1)	18(1)	0(1)	0	0
C(1)	30(1)	24(1)	25(1)	1(1)	0	0
C(2)	33(1)	24(1)	31(1)	-2(1)	0	0
C(3)	33(1)	29(1)	23(1)	0(1)	0(1)	0(1)
C(1K)	47(1)	36(1)	58(1)	20(1)	-9(1)	2(1)
C(2K)	49(1)	53(1)	47(1)	17(1)	-15(1)	-4(1)

C(3K)	27(1)	35(1)	41(1)	-5(1)	-2(1)	3(1)
C(4K)	30(1)	33(1)	43(1)	-4(1)	-9(1)	2(1)
C(5K)	45(1)	27(1)	48(1)	-6(1)	-9(1)	1(1)
C(6K)	46(1)	40(1)	36(1)	-13(1)	-11(1)	7(1)
C(1L)	28(1)	29(1)	52(2)	-5(1)	0	0
C(2L)	79(2)	42(2)	48(2)	-11(1)	0	0
N(1)	41(1)	27(1)	40(1)	5(1)	0	0
N(2)	45(1)	29(1)	53(1)	-9(1)	0	0
N(3)	41(1)	52(1)	30(1)	-1(1)	8(1)	2(1)
N(1L)	55(1)	63(1)	53(2)	5(1)	0	0
O(1K)	41(1)	30(1)	39(1)	12(1)	0	0
O(2K)	32(1)	31(1)	31(1)	1(1)	-6(1)	-1(1)
O(3K)	36(1)	31(1)	32(1)	-5(1)	-8(1)	6(1)
O(4K)	39(1)	74(1)	52(1)	-39(1)	0	0

Torsionswinkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_4 \cdot 18\text{-Krone-6} \cdot \text{CH}_3\text{CN}$.

C(3)#1-Te(1)-C(1)-N(1)	47.11(4)
C(3)-Te(1)-C(1)-N(1)	-47.11(4)
C(2)-Te(1)-C(1)-N(1)	0.000(3)
O(2K)-Te(1)-C(1)-N(1)	-104.12(4)
O(3K)-Te(1)-C(1)-N(1)	-120.94(3)
O(1K)-Te(1)-C(1)-N(1)	180.000(3)
O(4K)-Te(1)-C(1)-N(1)	180.000(3)
C(3)#1-Te(1)-C(2)-N(2)	-47.08(5)
C(3)-Te(1)-C(2)-N(2)	47.08(5)
C(1)-Te(1)-C(2)-N(2)	0.000(8)
O(2K)-Te(1)-C(2)-N(2)	120.13(3)
O(3K)-Te(1)-C(2)-N(2)	102.98(5)
O(1K)-Te(1)-C(2)-N(2)	180.000(8)
O(4K)-Te(1)-C(2)-N(2)	180.000(8)
C(3)#1-Te(1)-C(3)-N(3)	-89(100)
C(2)-Te(1)-C(3)-N(3)	-167(100)
C(1)-Te(1)-C(3)-N(3)	-12(100)
O(2K)-Te(1)-C(3)-N(3)	120(100)
O(3K)-Te(1)-C(3)-N(3)	59(100)
O(1K)-Te(1)-C(3)-N(3)	142(100)
O(4K)-Te(1)-C(3)-N(3)	39(98)
O(1K)-C(1K)-C(2K)-O(2K)	63.6(2)
O(2K)-C(3K)-C(4K)-O(3K)	61.58(18)
O(3K)-C(5K)-C(6K)-O(4K)	60.71(18)
C(2K)-C(1K)-O(1K)-C(1K)#1	178.17(13)
C(2K)-C(1K)-O(1K)-Te(1)	-48.42(19)
C(3)#1-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	8.86(15)
C(3)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	122.64(13)
C(2)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	65.75(13)
C(1)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	-114.25(13)
O(2K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	148.99(15)
O(3K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	-167.28(13)
O(4K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)#1	-114.25(13)
C(3)#1-Te(1)-O(1K)-C(1K)	-122.64(13)
C(3)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	-8.86(15)
C(2)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	-65.75(13)
C(1)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	114.25(13)
O(2K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	17.50(12)
O(3K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	61.23(13)
O(4K)-Te(1)-O(1K)-C(1K)	114.25(13)
C(4K)-C(3K)-O(2K)-C(2K)	78.98(17)
C(4K)-C(3K)-O(2K)-Te(1)	-59.32(15)

C(1K)-C(2K)-O(2K)-C(3K)	175.77(14)
C(1K)-C(2K)-O(2K)-Te(1)	-48.78(18)
C(3)#1-Te(1)-O(2K)-C(3K)	-113.22(12)
C(3)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	-52.52(11)
C(2)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	-136.37(12)
C(1)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	8.09(12)
O(3K)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	26.85(10)
O(1K)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	151.27(12)
O(4K)-Te(1)-O(2K)-C(3K)	69.40(11)
C(3)#1-Te(1)-O(2K)-C(2K)	112.37(13)
C(3)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	173.06(12)
C(2)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	89.21(12)
C(1)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	-126.32(12)
O(3K)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	-107.56(12)
O(1K)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	16.86(11)
O(4K)-Te(1)-O(2K)-C(2K)	-65.02(12)
C(3K)-C(4K)-O(3K)-C(5K)	-172.66(13)
C(3K)-C(4K)-O(3K)-Te(1)	-33.06(16)
C(6K)-C(5K)-O(3K)-C(4K)	89.75(16)
C(6K)-C(5K)-O(3K)-Te(1)	-50.00(15)
C(3)#1-Te(1)-O(3K)-C(4K)	147.32(12)
C(3)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	83.21(12)
C(2)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	24.06(14)
C(1)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	167.61(13)
O(2K)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	4.58(12)
O(1K)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	-38.34(12)
O(4K)-Te(1)-O(3K)-C(4K)	-118.62(13)
C(3)#1-Te(1)-O(3K)-C(5K)	-75.76(13)
C(3)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	-139.87(11)
C(2)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	160.98(12)
C(1)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	-55.47(11)
O(2K)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	141.50(11)
O(1K)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	98.58(11)
O(4K)-Te(1)-O(3K)-C(5K)	18.30(11)
C(5K)-C(6K)-O(4K)-C(6K)#1	147.07(17)
C(5K)-C(6K)-O(4K)-Te(1)	-44.3(2)
C(3)#1-Te(1)-O(4K)-C(6K)	152.46(16)
C(3)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	39.3(2)
C(2)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	-84.11(18)
C(1)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	95.89(18)
O(2K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	-29.22(18)
O(3K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	15.19(15)
O(1K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)	-84.11(18)
C(3)#1-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	-39.3(2)
C(3)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	-152.46(16)
C(2)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	84.11(18)
C(1)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	-95.89(18)
O(2K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	139.01(18)
O(3K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	-176.6(2)
O(1K)-Te(1)-O(4K)-C(6K)#1	84.11(18)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,y,z

6.1.7. Te(CN)₂F₂·(dme)₂

Bezeichnung	gos1	
Summenformel	C ₁₀ H ₂₀ F ₂ N ₂ O ₄ Te	
Molmasse	397.88 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	C2/c	
Zelldimensionen	a = 15.132(2) Å	α = 90°.
	b = 7.929(2) Å	β = 111.911(2)°.
	c = 14.201(2) Å	γ = 90°.
Volumen	1580.9(4) Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.672 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.913 mm ⁻¹	
F(000)	784	
Kristalldimensionen	0.45 x 0.35 x 0.3 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.90 bis 30.53°.	
Bereich der Indizes	-21 ≤ h ≤ 21, -11 ≤ k ≤ 8, -20 ≤ l ≤ 15	
Anzahl gemessene Reflexe	9490	
unabhängige Reflexe	2412 [R(int) = 0.0153]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.53°	99.5 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.826	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	2412 / 0 / 89	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.116	
Endgültiger Fehler R [$l > 2\sigma(l)$]	R ₁ = 0.0129, wR ₂ = 0.0309	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0137, wR ₂ = 0.0311	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.338 und -0.371 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å² x 10³) für Te(CN)₂F₂·(dme)₂. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	0	3385(1)	7500	15(1)
F(1)	779(1)	4093(1)	6730(1)	22(1)
N(1)	1413(1)	6085(1)	9063(1)	30(1)
O(1L)	586(1)	1677(1)	9348(1)	23(1)
O(2L)	1752(1)	1635(1)	8218(1)	21(1)
C(1)	909(1)	5162(1)	8502(1)	20(1)
C(1L)	433(1)	2382(2)	10203(1)	34(1)
C(2L)	1447(1)	719(2)	9663(1)	24(1)
C(3L)	1631(1)	172(1)	8741(1)	24(1)
C(4L)	2095(1)	1193(2)	7440(1)	29(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für Te(CN)₂F₂·(dme)₂.

Te(1)-F(1)#1	1.9653(6)
Te(1)-F(1)	1.9653(6)
Te(1)-C(1)	2.108(2)

Te(1)-C(1)#1	2.108(2)
Te(1)-O(1L)	2.7882(9)
Te(1)-O(2L)	2.8243(8)
N(1)-C(1)	1.1395(15)
O(1L)-C(2L)	1.4286(13)
O(1L)-C(1L)	1.4312(14)
O(2L)-C(3L)	1.4256(13)
O(2L)-C(4L)	1.4281(14)
C(2L)-C(3L)	1.5011(16)

F(1)#1-Te(1)-F(1)	146.82(4)
F(1)#1-Te(1)-C(1)	79.04(3)
F(1)-Te(1)-C(1)	78.96(4)
F(1)#1-Te(1)-C(1)#1	78.96(4)
F(1)-Te(1)-C(1)#1	79.04(3)
C(1)-Te(1)-C(1)#1	96.10(6)
F(1)#1-Te(1)-O(1L)	70.18(3)
F(1)-Te(1)-O(1L)	128.06(3)
C(1)-Te(1)-O(1L)	77.94(3)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)	149.14(3)
F(1)#1-Te(1)-O(2L)	128.08(3)
F(1)-Te(1)-O(2L)	70.35(3)
C(1)-Te(1)-O(2L)	78.24(3)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)	149.39(3)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	59.72(2)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	111.07(9)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	119.02(6)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	120.88(7)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	110.93(9)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	107.60(6)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	113.84(7)
N(1)-C(1)-Te(1)	178.00(11)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	109.00(9)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	108.73(9)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x,y,-z+3/2

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_2\text{F}_2 \cdot (\text{dme})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	13(1)	14(1)	17(1)	0	6(1)	0
F(1)	19(1)	25(1)	23(1)	3(1)	10(1)	-2(1)
N(1)	27(1)	26(1)	32(1)	-3(1)	6(1)	-4(1)
O(1L)	26(1)	24(1)	20(1)	2(1)	11(1)	5(1)
O(2L)	23(1)	20(1)	23(1)	1(1)	12(1)	4(1)
C(1)	19(1)	19(1)	24(1)	0(1)	8(1)	0(1)
C(1L)	46(1)	39(1)	24(1)	3(1)	21(1)	9(1)
C(2L)	25(1)	27(1)	20(1)	6(1)	7(1)	5(1)
C(3L)	27(1)	19(1)	25(1)	3(1)	9(1)	5(1)
C(4L)	31(1)	32(1)	30(1)	1(1)	18(1)	8(1)

Torsionswinkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_2\text{F}_2 \cdot (\text{dme})_2$.

F(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-169.58(8)
F(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-21.61(9)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-87.03(8)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-168.67(8)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-3.73(7)
F(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-25.41(9)
F(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	122.56(9)
C(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	57.13(9)
C(1)#1-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-24.51(12)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	140.44(9)
F(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(3L)	51.79(7)
F(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-160.07(7)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	117.59(7)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-160.37(8)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	34.80(6)
F(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(4L)	175.15(7)
F(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-36.71(8)
C(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-119.05(8)
C(1)#1-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-37.01(11)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	158.16(8)
F(1)#1-Te(1)-C(1)-N(1)	92(3)
F(1)-Te(1)-C(1)-N(1)	-113(3)
C(1)#1-Te(1)-C(1)-N(1)	169(3)
O(1L)-Te(1)-C(1)-N(1)	20(3)
O(2L)-Te(1)-C(1)-N(1)	-41(3)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-173.66(10)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-26.24(12)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	169.70(9)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-65.17(9)
O(1L)-C(2L)-C(3L)-O(2L)	61.97(12)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x,y,-z+3/2

6.1.8. $\text{Te}(\text{CN})_2\text{Cl}_2 \cdot \text{Te}(\text{CN})\text{Cl}_3 \cdot (\text{dme})_4$

Bezeichnung	tecl2m	
Summenformel	$\text{C}_{20} \text{H}_{40} \text{Cl}_4 \text{N}_4 \text{O}_8 \text{Te}_2$	
Molmasse	861.56 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	orthorhombisch	
Raumgruppe	Pbca	
Zelldimensionen	a = 14.123(4) Å	$\alpha = 90^\circ$.
	b = 14.595(5) Å	$\beta = 90^\circ$.
	c = 32.551(10) Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	6710(4) Å ³	
Z	8	
Dichte (berechnet)	1.706 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.101 mm ⁻¹	
F(000)	3392	
Kristalldimensionen	0.27 x 0.22 x 0.19 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.25 bis 27.52°.	
Bereich der Indizes	-16<=h<=18, -18<=k<=18, -42<=l<=42	

Anzahl gemessene Reflexe	62514
unabhängige Reflexe	7702 [R(int) = 0.1348]
Vollständigkeit zu Theta = 27.52°	99.8 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.568
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²
Reflexe / restraints / Parameter	7702 / 0 / 332
Goodness-of-fit gegen F ²	1.231
Endgültiger Fehler R [$\geq 2\sigma(I)$]	R1 = 0.1166, wR2 = 0.2601
R (alle Daten)	R1 = 0.1439, wR2 = 0.2725
Größte und kleinste Restelektronendichte	4.938 und -3.337 e.Å ⁻³

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_2\text{Cl}_2 \cdot \text{Te}(\text{CN})\text{Cl}_3 \cdot (\text{dme})_4$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	6966(1)	425(1)	6905(1)	24(1)
Te(2)	6911(1)	6327(1)	4455(1)	23(1)
Cl(1)	6095(3)	1253(3)	6359(2)	39(1)
Cl(2)	7265(3)	-552(3)	7512(1)	33(1)
Cl(3)	5985(3)	7191(3)	3934(1)	36(1)
Cl(4)	7293(3)	5364(3)	5056(1)	35(1)
N(1)	5035(12)	-740(12)	6880(5)	46(4)
N(2)	6135(19)	1602(18)	7422(8)	72(9)
N(3)	5110(20)	5273(18)	4478(6)	70(7)
N(4)	6095(17)	7690(17)	5058(8)	75(6)
O(1L)	8257(7)	1635(7)	6459(3)	25(2)
O(2L)	8426(9)	1442(9)	7313(3)	34(3)
O(3L)	7207(8)	-900(8)	6360(3)	30(3)
O(4L)	8926(8)	-490(9)	6786(3)	33(3)
O(5L)	8442(8)	7301(9)	4832(3)	32(3)
O(6L)	8168(8)	7538(7)	3990(3)	26(2)
O(7L)	8795(8)	5430(9)	4261(4)	36(3)
O(8L)	7035(8)	4999(8)	3878(3)	30(2)
C(1)	5672(11)	-368(12)	6894(5)	27(3)
C(2)	6239(11)	1433(11)	7336(5)	13(3)
C(3)	5535(14)	5561(12)	4503(7)	24(4)
C(4)	6293(9)	7366(8)	4888(4)	9(2)
C(1L)	8485(14)	1259(13)	6067(5)	40(4)
C(2L)	9070(10)	1939(13)	6676(5)	31(4)
C(3L)	8774(12)	2217(12)	7099(5)	34(4)
C(4L)	8373(16)	1622(16)	7746(5)	49(5)
C(5L)	6582(14)	-957(15)	6016(5)	42(5)
C(6L)	8120(13)	-1298(12)	6265(5)	35(4)
C(7L)	8710(11)	-1379(13)	6640(5)	32(4)
C(8L)	9533(13)	-542(15)	7131(6)	42(4)
C(9L)	8452(14)	7482(14)	5266(5)	39(5)
C(10L)	8751(11)	8083(13)	4618(5)	35(4)
C(11L)	9018(10)	7804(13)	4187(5)	33(4)
C(12L)	8340(15)	7191(14)	3591(6)	44(5)
C(13L)	9475(13)	5325(14)	4582(6)	42(4)
C(14L)	8581(13)	4540(13)	4103(6)	41(4)
C(15L)	7923(13)	4690(13)	3744(6)	41(5)
C(16L)	6360(14)	5004(14)	3554(5)	39(4)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_2\text{Cl}_2 \cdot \text{Te}(\text{CN})\text{Cl}_3 \cdot (\text{dme})_4$.

Te(1)-C(1)	2.164(17)
Te(1)-C(2)	2.276(17)
Te(1)-Cl(2)	2.473(4)
Te(1)-Cl(1)	2.477(4)
Te(1)-O(3L)	2.647(11)
Te(1)-O(2L)	2.865(12)
Te(1)-O(1L)	2.924(10)
Te(1)-O(4L)	3.097(12)
Te(2)-C(4)	2.247(13)
Te(2)-C(3)	2.247(19)
Te(2)-Cl(4)	2.468(4)
Te(2)-Cl(3)	2.485(4)
Te(2)-O(8L)	2.702(10)
Te(2)-O(5L)	2.865(12)
Te(2)-O(6L)	2.927(11)
Te(2)-O(7L)	3.031(12)
N(1)-C(1)	1.05(2)
N(3)-C(3)	0.73(3)
N(4)-C(4)	0.78(2)
O(1L)-C(2L)	1.421(17)
O(1L)-C(1L)	1.426(19)
O(2L)-C(3L)	1.42(2)
O(2L)-C(4L)	1.438(18)
O(3L)-C(5L)	1.428(19)
O(3L)-C(6L)	1.45(2)
O(4L)-C(7L)	1.41(2)
O(4L)-C(8L)	1.416(19)
O(5L)-C(10L)	1.41(2)
O(5L)-C(9L)	1.435(19)
O(6L)-C(11L)	1.415(19)
O(6L)-C(12L)	1.42(2)
O(7L)-C(13L)	1.43(2)
O(7L)-C(14L)	1.43(2)
O(8L)-C(15L)	1.40(2)
O(8L)-C(16L)	1.42(2)
C(2L)-C(3L)	1.49(2)
C(6L)-C(7L)	1.48(2)
C(10L)-C(11L)	1.51(2)
C(14L)-C(15L)	1.51(3)
C(1)-Te(1)-C(2)	88.6(6)
C(1)-Te(1)-Cl(2)	81.3(4)
C(2)-Te(1)-Cl(2)	87.6(4)
C(1)-Te(1)-Cl(1)	80.2(4)
C(2)-Te(1)-Cl(1)	84.4(4)
Cl(2)-Te(1)-Cl(1)	159.98(15)
C(1)-Te(1)-O(3L)	72.9(5)
C(2)-Te(1)-O(3L)	160.5(5)
Cl(2)-Te(1)-O(3L)	95.3(3)
Cl(1)-Te(1)-O(3L)	86.5(3)
C(1)-Te(1)-O(2L)	153.2(5)
C(2)-Te(1)-O(2L)	72.8(4)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)	78.8(3)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)	115.9(3)
O(3L)-Te(1)-O(2L)	126.6(3)
C(1)-Te(1)-O(1L)	147.2(5)
C(2)-Te(1)-O(1L)	101.4(4)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)	129.7(2)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)	70.0(2)
O(3L)-Te(1)-O(1L)	91.6(3)

O(2L)-Te(1)-O(1L)	57.9(3)
C(1)-Te(1)-O(4L)	121.4(5)
C(2)-Te(1)-O(4L)	139.3(4)
Cl(2)-Te(1)-O(4L)	72.5(2)
Cl(1)-Te(1)-O(4L)	124.4(2)
O(3L)-Te(1)-O(4L)	59.1(3)
O(2L)-Te(1)-O(4L)	68.8(3)
O(1L)-Te(1)-O(4L)	69.0(3)
C(4)-Te(2)-C(3)	87.5(6)
C(4)-Te(2)-Cl(4)	88.4(3)
C(3)-Te(2)-Cl(4)	81.4(5)
C(4)-Te(2)-Cl(3)	83.2(3)
C(3)-Te(2)-Cl(3)	81.1(5)
Cl(4)-Te(2)-Cl(3)	160.87(15)
C(4)-Te(2)-O(8L)	160.8(4)
C(3)-Te(2)-O(8L)	75.4(6)
Cl(4)-Te(2)-O(8L)	97.4(3)
Cl(3)-Te(2)-O(8L)	85.7(3)
C(4)-Te(2)-O(5L)	71.9(4)
C(3)-Te(2)-O(5L)	150.4(6)
Cl(4)-Te(2)-O(5L)	77.1(3)
Cl(3)-Te(2)-O(5L)	116.0(3)
O(8L)-Te(2)-O(5L)	127.2(3)
C(4)-Te(2)-O(6L)	98.7(4)
C(3)-Te(2)-O(6L)	149.4(6)
Cl(4)-Te(2)-O(6L)	128.4(2)
Cl(3)-Te(2)-O(6L)	70.1(2)
O(8L)-Te(2)-O(6L)	92.0(3)
O(5L)-Te(2)-O(6L)	57.6(3)
C(4)-Te(2)-O(7L)	139.7(4)
C(3)-Te(2)-O(7L)	124.0(5)
Cl(4)-Te(2)-O(7L)	74.2(2)
Cl(3)-Te(2)-O(7L)	122.6(3)
O(8L)-Te(2)-O(7L)	59.3(3)
O(5L)-Te(2)-O(7L)	69.0(3)
O(6L)-Te(2)-O(7L)	67.7(3)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	112.6(13)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	116.4(9)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	110.7(9)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	110.8(14)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	115.9(9)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	120.8(11)
C(5L)-O(3L)-C(6L)	111.1(13)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	119.3(11)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	123.4(9)
C(7L)-O(4L)-C(8L)	110.4(14)
C(7L)-O(4L)-Te(1)	104.2(9)
C(8L)-O(4L)-Te(1)	117.7(10)
C(10L)-O(5L)-C(9L)	109.5(13)
C(10L)-O(5L)-Te(2)	115.1(9)
C(9L)-O(5L)-Te(2)	121.4(9)
C(11L)-O(6L)-C(12L)	111.7(14)
C(11L)-O(6L)-Te(2)	116.5(9)
C(12L)-O(6L)-Te(2)	111.2(10)
C(13L)-O(7L)-C(14L)	107.9(14)
C(13L)-O(7L)-Te(2)	119.1(10)
C(14L)-O(7L)-Te(2)	106.4(9)
C(15L)-O(8L)-C(16L)	111.7(13)
C(15L)-O(8L)-Te(2)	120.4(9)
C(16L)-O(8L)-Te(2)	117.9(10)
N(1)-C(1)-Te(1)	178.1(18)
N(3)-C(3)-Te(2)	168(4)

N(4)-C(4)-Te(2)	174(2)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	108.6(12)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	109.4(15)
O(3L)-C(6L)-C(7L)	111.0(13)
O(4L)-C(7L)-C(6L)	109.0(15)
O(5L)-C(10L)-C(11L)	108.6(14)
O(6L)-C(11L)-C(10L)	106.5(12)
O(7L)-C(14L)-C(15L)	106.2(15)
O(8L)-C(15L)-C(14L)	110.9(14)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_2\text{Cl}_2 \cdot \text{Te}(\text{CN})\text{Cl}_3 \cdot (\text{dme})_4$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^* 2U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	22(1)	26(1)	23(1)	-2(1)	1(1)	-3(1)
Te(2)	24(1)	24(1)	22(1)	-2(1)	-2(1)	1(1)
Cl(1)	29(2)	32(2)	56(3)	7(2)	-14(2)	-2(2)
Cl(2)	37(2)	36(2)	26(2)	5(2)	5(2)	-5(2)
Cl(3)	31(2)	30(2)	46(2)	6(2)	-15(2)	1(2)
Cl(4)	38(2)	37(2)	29(2)	6(2)	-1(2)	-1(2)
N(1)	41(9)	52(10)	44(9)	0(8)	7(8)	-14(8)
N(3)	110(20)	78(19)	20(9)	0(11)	8(13)	32(16)
O(1L)	21(5)	28(6)	27(5)	6(4)	-1(4)	-6(4)
O(2L)	41(7)	41(7)	20(5)	-1(5)	6(5)	-7(6)
O(3L)	30(6)	39(7)	21(5)	-8(5)	0(4)	4(5)
O(4L)	34(6)	34(6)	32(6)	0(5)	-4(5)	-4(6)
O(5L)	28(6)	42(7)	27(6)	-3(5)	6(5)	-8(5)
O(6L)	29(6)	22(6)	26(5)	1(4)	1(5)	-1(4)
O(7L)	35(6)	36(7)	36(6)	1(6)	0(5)	3(6)
O(8L)	38(6)	30(6)	21(5)	-11(4)	4(5)	-3(5)
C(1)	24(8)	35(9)	23(7)	-4(7)	-3(6)	1(7)
C(3)	36(10)	7(7)	29(9)	-12(6)	-21(8)	4(6)
C(1L)	53(11)	34(10)	33(9)	-5(8)	10(8)	-12(9)
C(2L)	11(7)	43(10)	37(9)	-5(8)	1(6)	-10(7)
C(3L)	25(8)	33(9)	45(10)	10(8)	-8(7)	5(7)
C(4L)	63(13)	62(14)	21(8)	-12(8)	9(8)	-16(11)
C(5L)	50(11)	55(12)	21(8)	-3(8)	-11(8)	-15(10)
C(6L)	43(10)	23(8)	39(9)	-15(7)	14(8)	-10(8)
C(7L)	21(7)	38(9)	36(9)	-5(8)	3(6)	-4(7)
C(8L)	34(9)	54(12)	38(9)	9(9)	-12(8)	4(9)
C(9L)	46(11)	49(12)	23(8)	-8(7)	-3(7)	-24(9)
C(10L)	18(7)	40(10)	47(10)	-3(8)	-13(7)	12(7)
C(11L)	11(7)	41(10)	48(10)	19(8)	0(7)	-2(7)
C(12L)	51(12)	37(10)	44(11)	-10(9)	11(9)	-5(9)
C(13L)	33(9)	45(11)	48(11)	9(9)	-5(8)	6(8)
C(14L)	33(9)	30(9)	60(12)	-12(9)	13(8)	14(8)
C(15L)	39(10)	37(10)	48(10)	-21(8)	18(8)	-11(8)
C(16L)	44(10)	46(11)	26(8)	-10(8)	-8(8)	-9(9)

6.1.9. [Te(CN)₂O·(dme)₂]₂

Bezeichnung	tecndim	
Summenformel	C ₁₀ H ₂₀ N ₂ O ₅ Te	
Molmasse	375.88 g/mol	
Messtemperatur	143(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /n	
Zelldimensionen	a = 9.250(1) Å	α = 90°
	b = 14.988(2) Å	β = 92.191(8)°
	c = 11.154(2) Å	γ = 90°
Volumen	1545.3(3) Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	1.616 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	1.939 mm ⁻¹	
F(000)	744	
Kristalldimensionen	0.41 x 0.25 x 0.12 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.28 bis 30.54°	
Bereich der Indizes	-12 ≤ h ≤ 13, -21 ≤ k ≤ 21, -12 ≤ l ≤ 15	
Anzahl gemessene Reflexe	25247	
unabhängige Reflexe	4695 [R(int) = 0.0139]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.54°	99.3 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.821	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	4695 / 0 / 167	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.041	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0149, wR ₂ = 0.0362	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0173, wR ₂ = 0.0376	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.529 und -0.480 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten (x 10⁴) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å²x 10³) für [Te(CN)₂O·(dme)₂]₂. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	9865(1)	234(1)	6363(1)	19(1)
N(1)	9091(2)	-1798(1)	7195(1)	39(1)
N(2)	12746(2)	-175(1)	8245(1)	50(1)
O(1)	11311(1)	119(1)	5209(1)	22(1)
O(1L)	6874(1)	66(1)	6928(1)	32(1)
O(2L)	8956(1)	574(1)	8794(1)	33(1)
O(3L)	8707(2)	1804(1)	5248(1)	46(1)
O(4L)	11280(2)	1945(1)	6728(1)	57(1)
C(1)	9425(1)	-1110(1)	6874(1)	27(1)
C(2)	11766(2)	-47(1)	7617(1)	33(1)
C(1L)	5967(2)	-568(2)	6314(2)	47(1)
C(2L)	6600(2)	82(1)	8177(1)	41(1)
C(3L)	7465(2)	806(1)	8773(1)	39(1)
C(4L)	9807(2)	1204(1)	9465(2)	47(1)
C(5L)	7190(2)	1789(2)	4982(2)	67(1)
C(6L)	9137(3)	2598(1)	5806(2)	72(1)
C(7L)	10728(3)	2624(1)	5922(2)	75(1)
C(8L)	12805(3)	1988(2)	6868(3)	106(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $[\text{Te}(\text{CN})_2\text{O} \cdot (\text{dme})_2]_2$.

Te(1)-O(1)	1.8991(9)
Te(1)-O(1)#1	2.0960(9)
Te(1)-C(1)	2.1367(13)
Te(1)-C(2)	2.2447(14)
Te(1)-O(3L)	2.8509(12)
Te(1)-O(1L)	2.8721(10)
Te(1)-O(4L)	2.9000(12)
Te(1)-O(2L)	2.9143(11)
Te(1)-Te(1)#1	3.1406(4)
N(1)-C(1)	1.1387(18)
N(2)-C(2)	1.140(2)
O(1)-Te(1)#1	2.0960(9)
O(1L)-C(1L)	1.425(2)
O(1L)-C(2L)	1.4254(19)
O(2L)-C(3L)	1.4219(18)
O(2L)-C(4L)	1.4235(19)
O(3L)-C(6L)	1.395(2)
O(3L)-C(5L)	1.423(3)
O(4L)-C(8L)	1.415(3)
O(4L)-C(7L)	1.438(3)
C(2L)-C(3L)	1.489(2)
C(6L)-C(7L)	1.473(4)
O(1)-Te(1)-O(1)#1	76.47(4)
O(1)-Te(1)-C(1)	103.93(4)
O(1)#1-Te(1)-C(1)	83.53(4)
O(1)-Te(1)-C(2)	81.36(5)
O(1)#1-Te(1)-C(2)	147.47(5)
C(1)-Te(1)-C(2)	79.02(6)
O(1)-Te(1)-O(3L)	92.43(4)
O(1)#1-Te(1)-O(3L)	70.66(4)
C(1)-Te(1)-O(3L)	145.30(5)
C(2)-Te(1)-O(3L)	134.35(5)
O(1)-Te(1)-O(1L)	148.20(3)
O(1)#1-Te(1)-O(1L)	71.83(3)
C(1)-Te(1)-O(1L)	70.36(4)
C(2)-Te(1)-O(1L)	125.82(4)
O(3L)-Te(1)-O(1L)	79.57(4)
O(1)-Te(1)-O(4L)	81.37(4)
O(1)#1-Te(1)-O(4L)	123.87(4)
C(1)-Te(1)-O(4L)	152.32(5)
C(2)-Te(1)-O(4L)	74.93(5)
O(3L)-Te(1)-O(4L)	59.45(4)
O(1L)-Te(1)-O(4L)	118.70(4)
O(1)-Te(1)-O(2L)	151.91(3)
O(1)#1-Te(1)-O(2L)	131.60(3)
C(1)-Te(1)-O(2L)	81.49(4)
C(2)-Te(1)-O(2L)	72.55(4)
O(3L)-Te(1)-O(2L)	98.32(3)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	59.78(3)
O(4L)-Te(1)-O(2L)	81.94(4)
O(1)-Te(1)-Te(1)#1	40.46(3)
O(1)#1-Te(1)-Te(1)#1	36.01(2)
C(1)-Te(1)-Te(1)#1	94.04(4)
C(2)-Te(1)-Te(1)#1	118.16(4)
O(3L)-Te(1)-Te(1)#1	78.73(3)
O(1L)-Te(1)-Te(1)#1	107.81(2)
O(4L)-Te(1)-Te(1)#1	106.33(3)
O(2L)-Te(1)-Te(1)#1	167.58(2)
Te(1)-O(1)-Te(1)#1	103.53(4)

C(1L)-O(1L)-C(2L)	110.93(12)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	120.50(9)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	114.92(8)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	111.34(13)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	109.93(8)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	115.57(9)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	111.64(18)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	114.45(13)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	115.42(11)
C(8L)-O(4L)-C(7L)	111.4(2)
C(8L)-O(4L)-Te(1)	119.91(16)
C(7L)-O(4L)-Te(1)	112.99(11)
N(1)-C(1)-Te(1)	174.11(13)
N(2)-C(2)-Te(1)	178.61(15)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	109.63(13)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	109.51(13)
O(3L)-C(6L)-C(7L)	109.18(18)
O(4L)-C(7L)-C(6L)	111.47(17)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+2,-y,-z+1

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{Te}(\text{CN})_2\text{O} \cdot (\text{dme})_2]_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	18(1)	20(1)	19(1)	0(1)	2(1)	-1(1)
N(1)	48(1)	31(1)	40(1)	7(1)	8(1)	-1(1)
N(2)	27(1)	87(1)	36(1)	10(1)	-1(1)	0(1)
O(1)	18(1)	30(1)	20(1)	0(1)	2(1)	-2(1)
O(1L)	24(1)	46(1)	27(1)	3(1)	4(1)	0(1)
O(2L)	34(1)	39(1)	27(1)	-8(1)	3(1)	0(1)
O(3L)	67(1)	26(1)	46(1)	1(1)	11(1)	8(1)
O(4L)	70(1)	46(1)	56(1)	-7(1)	14(1)	-33(1)
C(1)	28(1)	28(1)	24(1)	3(1)	4(1)	2(1)
C(2)	24(1)	51(1)	24(1)	3(1)	2(1)	-2(1)
C(1L)	27(1)	75(1)	38(1)	1(1)	-2(1)	-13(1)
C(2L)	28(1)	64(1)	30(1)	4(1)	10(1)	-1(1)
C(3L)	41(1)	47(1)	29(1)	-3(1)	9(1)	12(1)
C(4L)	58(1)	49(1)	32(1)	-13(1)	2(1)	-13(1)
C(5L)	68(1)	62(1)	70(1)	15(1)	1(1)	37(1)
C(6L)	127(2)	25(1)	65(1)	-6(1)	4(1)	4(1)
C(7L)	144(3)	36(1)	47(1)	-7(1)	23(1)	-44(1)
C(8L)	73(2)	92(2)	153(3)	-25(2)	17(2)	-56(2)

6.1.10. $\text{Te}(\text{CN})_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$

Bezeichnung	teclcn	
Summenformel	$\text{C}_5 \text{H}_9 \text{Cl N}_2 \text{ Si Te}$	
Molmasse	288.28 g/mol	
Messtemperatur	133(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	orthorhombisch	
Raumgruppe	$\text{Pmc}2_1$	
Zelldimensionen	$a = 7.681(2) \text{ Å}$	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 5.905(1) \text{ Å}$	$\beta = 90^\circ$.
	$c = 11.573(2) \text{ Å}$	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$524.92(14) \text{ Å}^3$	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.824 Mg/m^3	
Absorptionskoeffizient	3.143 mm^{-1}	
F(000)	272	
Kristalldimensionen	$0.28 \times 0.18 \times 0.15 \text{ mm}^3$	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.65 bis 30.53° .	
Bereich der Indizes	$-8 \leq h \leq 10, -6 \leq k \leq 8, -16 \leq l \leq 16$	
Anzahl gemessene Reflexe	6230	
unabhängige Reflexe	1700 [R(int) = 0.0175]	
Vollständigkeit zu $\Theta = 30.53^\circ$	99.4 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.766	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F^2	
Reflexe / restraints / Parameter	1700 / 1 / 60	
Goodness-of-fit gegen F^2	1.090	
Endgültiger Fehler R [$> 2\sigma(I)$]	$R1 = 0.0147, wR2 = 0.0327$	
R (alle Daten)	$R1 = 0.0151, wR2 = 0.0328$	
Flack-Parameter	-0.018(18)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.640 und -0.756 e.Å^{-3}	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
Te(1)	10000	5565(1)	8238(1)	15(1)
Si(1)	5000	9310(1)	5503(1)	21(1)
Cl(1)	5000	7457(2)	7041(1)	44(1)
N(1)	10000	6014(4)	5457(2)	26(1)
N(2)	10000	132(5)	7908(2)	31(1)
C(1)	10000	5817(4)	6442(2)	18(1)
C(2)	10000	2048(5)	8005(2)	21(1)
C(1L)	6974(3)	11104(4)	5492(2)	35(1)
C(2L)	5000	7203(7)	4313(3)	42(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $\text{Te}(\text{CN})_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$.

Te(1)-C(1)	2.084(2)
Te(1)-C(2)	2.094(3)
Si(1)-C(1L)	1.850(2)
Si(1)-C(1L)#1	1.850(2)

Si(1)-C(2L)	1.855(4)
Si(1)-Cl(1)	2.090(1)
N(1)-C(1)	1.146(3)
N(2)-C(2)	1.137(4)
C(1)-Te(1)-C(2)	86.71(8)
C(1L)-Si(1)-C(1L)#1	110.11(16)
C(1L)-Si(1)-C(2L)	112.27(11)
C(1L)#1-Si(1)-C(2L)	112.27(11)
C(1L)-Si(1)-Cl(1)	107.80(9)
C(1L)#1-Si(1)-Cl(1)	107.80(9)
C(2L)-Si(1)-Cl(1)	106.33(13)
N(1)-C(1)-Te(1)	178.3(2)
N(2)-C(2)-Te(1)	178.28(19)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:
#1 -x+1,y,z

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{Te}(\text{CN})_2 \cdot (\text{CH}_3)_3\text{SiCl}$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^*^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	24(1)	10(1)	11(1)	0(1)	0	0
Si(1)	22(1)	19(1)	23(1)	3(1)	0	0
Cl(1)	51(1)	46(1)	35(1)	19(1)	0	0
N(1)	44(1)	17(1)	16(1)	-1(1)	0	0
N(2)	52(2)	19(1)	20(1)	0(1)	0	0
C(1)	29(1)	13(1)	14(1)	-1(1)	0	0
C(2)	30(1)	17(1)	15(1)	1(1)	0	0
C(1L)	26(1)	30(1)	48(1)	6(1)	-1(1)	-5(1)
C(2L)	53(2)	33(2)	41(2)	-7(1)	0	0

6.1.11. $\text{TeF}_4 \cdot (\text{dme})_2$

Bezeichnung	tefdme	
Summenformel	$\text{C}_8 \text{H}_{20} \text{F}_4 \text{O}_4 \text{Te}$	
Molmasse	383.84 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	$P2_1$	
Zelldimensionen	$a = 7.587(3) \text{ \AA}$ $b = 12.256(4) \text{ \AA}$ $c = 8.272(3) \text{ \AA}$	$\alpha = 90^\circ$. $\beta = 110.259(7)^\circ$. $\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$721.5(4) \text{ \AA}^3$	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.767 Mg/m^3	
Absorptionskoeffizient	2.107 mm^{-1}	

F(000)	376
Kristalldimensionen	0.23 x 0.2 x 0.19 mm ³
Theta-Bereich der Datensammlung	2.62 bis 30.57°.
Bereich der Indizes	-10<=h<=10, -14<=k<=17, -11<=l<=9
Anzahl gemessene Reflexe	7732
unabhängige Reflexe	3669 [R(int) = 0.0202]
Vollständigkeit zu Theta = 30.57°	99.0 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.829
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²
Reflexe / restraints / Parameter	3669 / 1 / 159
Goodness-of-fit gegen F ²	1.105
Endgültiger Fehler R [$l > 2\sigma(l)$]	R ₁ = 0.0379, wR ₂ = 0.1089
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0427, wR ₂ = 0.1122
Flack-Parameter	0.23(5)
Größte und kleinste Restelektronendichte	2.198 und -1.067 e.Å ⁻³

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für TeF₄·(dme)₂. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	2639(1)	5977(1)	8286(1)	27(1)
F(1)	4368(6)	5966(10)	10624(5)	82(2)
F(2)	471(7)	6392(5)	6290(7)	64(2)
F(3)	917(6)	5701(3)	9407(6)	43(1)
F(4)	3234(7)	4502(4)	8139(7)	47(1)
O(1L)	6352(8)	6556(5)	8486(8)	50(1)
O(2L)	3858(6)	5929(10)	5357(6)	53(2)
O(3L)	671(8)	7974(5)	6499(7)	44(1)
O(4L)	2671(8)	7912(5)	9917(7)	43(1)
C(1L)	7343(14)	7290(10)	9857(16)	73(4)
C(2L)	6624(11)	6816(8)	6916(13)	50(2)
C(3L)	5823(9)	5964(14)	5681(8)	44(2)
C(4L)	2971(16)	4985(9)	4160(12)	63(3)
C(5L)	440(20)	7867(10)	4701(11)	76(4)
C(6L)	1994(11)	8799(7)	7281(12)	45(2)
C(7L)	2109(12)	8915(7)	9094(12)	49(2)
C(8L)	2910(15)	7990(10)	11744(11)	63(3)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für TeF₄·(dme)₂.

Te(1)-F(3)	1.876(4)
Te(1)-F(4)	1.878(5)
Te(1)-F(1)	1.924(4)
Te(1)-F(2)	1.952(5)
Te(1)-O(4L)	2.725(6)
Te(1)-O(1L)	2.854(6)
Te(1)-O(2L)	2.878(5)
Te(1)-O(3L)	2.979(6)
O(1L)-C(2L)	1.420(11)
O(1L)-C(1L)	1.439(10)
O(2L)-C(3L)	1.422(7)
O(2L)-C(4L)	1.520(12)
O(3L)-C(6L)	1.414(10)
O(3L)-C(5L)	1.441(9)

O(4L)-C(7L)	1.398(10)
O(4L)-C(8L)	1.461(10)
C(2L)-C(3L)	1.441(16)
C(6L)-C(7L)	1.479(14)
F(3)-Te(1)-F(4)	94.8(2)
F(3)-Te(1)-F(1)	81.4(2)
F(4)-Te(1)-F(1)	87.9(4)
F(3)-Te(1)-F(2)	86.4(2)
F(4)-Te(1)-F(2)	110.3(2)
F(1)-Te(1)-F(2)	159.0(3)
F(3)-Te(1)-O(4L)	78.48(18)
F(4)-Te(1)-O(4L)	155.4(2)
F(1)-Te(1)-O(4L)	67.8(4)
F(2)-Te(1)-O(4L)	93.0(2)
F(3)-Te(1)-O(1L)	149.15(19)
F(4)-Te(1)-O(1L)	89.3(2)
F(1)-Te(1)-O(1L)	68.1(3)
F(2)-Te(1)-O(1L)	120.7(2)
O(4L)-Te(1)-O(1L)	85.15(18)
F(3)-Te(1)-O(2L)	153.4(2)
F(4)-Te(1)-O(2L)	76.8(3)
F(1)-Te(1)-O(2L)	122.67(17)
F(2)-Te(1)-O(2L)	73.5(2)
O(4L)-Te(1)-O(2L)	119.0(3)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	57.00(17)
F(3)-Te(1)-O(3L)	94.48(17)
F(4)-Te(1)-O(3L)	148.12(19)
F(1)-Te(1)-O(3L)	123.7(4)
F(2)-Te(1)-O(3L)	40.1(2)
O(4L)-Te(1)-O(3L)	56.47(16)
O(1L)-Te(1)-O(3L)	98.02(18)
O(2L)-Te(1)-O(3L)	81.4(2)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	112.3(8)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	117.1(4)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	115.9(5)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	110.1(9)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	117.6(4)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	111.4(6)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	110.5(8)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	101.9(4)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	107.4(5)
C(7L)-O(4L)-C(8L)	110.7(8)
C(7L)-O(4L)-Te(1)	125.1(5)
C(8L)-O(4L)-Te(1)	123.1(6)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	109.1(7)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	108.2(8)
O(3L)-C(6L)-C(7L)	108.4(6)
O(4L)-C(7L)-C(6L)	108.1(7)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{TeF}_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	28(1)	25(1)	31(1)	3(1)	13(1)	0(1)
F(1)	49(2)	160(6)	33(2)	-27(5)	7(2)	46(5)
F(2)	39(2)	96(5)	52(3)	17(3)	9(2)	16(2)

F(3)	44(2)	42(3)	55(2)	4(2)	35(2)	-3(2)
F(4)	55(3)	31(2)	59(3)	2(2)	27(2)	1(2)
O(1L)	42(3)	56(4)	57(3)	-15(3)	24(3)	-14(3)
O(2L)	42(2)	75(4)	46(2)	-28(5)	23(2)	-3(5)
O(3L)	54(3)	46(3)	40(3)	5(2)	25(2)	6(2)
O(4L)	60(3)	33(3)	39(3)	-6(2)	21(2)	-1(2)
C(1L)	47(5)	83(8)	89(8)	-50(7)	25(5)	-25(5)
C(2L)	34(3)	49(5)	74(6)	7(4)	27(4)	-3(3)
C(3L)	41(3)	51(4)	48(3)	10(7)	27(3)	21(6)
C(4L)	88(7)	61(7)	48(5)	-23(4)	31(5)	-25(5)
C(5L)	127(10)	70(7)	36(4)	23(4)	35(5)	47(7)
C(6L)	42(4)	33(4)	68(5)	16(4)	28(4)	6(3)
C(7L)	42(4)	32(4)	70(5)	2(4)	16(4)	-10(3)
C(8L)	66(5)	73(7)	50(5)	-26(5)	22(4)	5(5)

Torsionswinkel [°] für $\text{TeF}_4 \cdot (\text{dme})_2$.

F(3)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-168.7(5)
F(4)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	93.1(6)
F(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-179.0(7)
F(2)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-20.3(7)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-110.9(6)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	18.5(6)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-55.8(6)
F(3)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-32.5(9)
F(4)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-130.7(8)
F(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-42.7(8)
F(2)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	116.0(8)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	25.3(8)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	154.7(9)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	80.5(8)
F(3)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-156.2(8)
F(4)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-82.4(10)
F(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-3.7(12)
F(2)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	161.4(11)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	77.2(10)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	15.5(9)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	121.0(10)
F(3)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-27.8(11)
F(4)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	46.0(7)
F(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	124.7(8)
F(2)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-70.2(7)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-154.4(7)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	144.0(8)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-110.6(7)
F(3)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	113.7(5)
F(4)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-139.8(5)
F(1)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	31.0(5)
F(2)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-167.2(6)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	40.7(4)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-38.0(5)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-92.7(5)
F(3)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-130.1(7)
F(4)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-23.6(8)
F(1)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	147.2(7)
F(2)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-51.0(7)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	156.9(8)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	78.2(7)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	23.5(7)
F(3)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-117.3(6)

F(4)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	166.7(6)
F(1)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	157.4(7)
F(2)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-31.5(6)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	89.0(6)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	41.2(6)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-13.9(5)
F(3)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	49.6(7)
F(4)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-26.4(9)
F(1)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-35.7(7)
F(2)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	135.4(7)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-104.1(7)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-151.9(6)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	153.0(7)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	171.8(8)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-50.4(8)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-175.8(9)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-46.8(12)
O(1L)-C(2L)-C(3L)-O(2L)	62.7(10)
C(5L)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	177.1(7)
Te(1)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	-69.0(6)
C(8L)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	176.9(7)
Te(1)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	-14.8(8)
O(3L)-C(6L)-C(7L)-O(4L)	59.6(8)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

6.1.12. TeF₄-dioxan

Bezeichnung	c2c	
Summenformel	C ₄ H ₈ F ₄ O ₂ Te	
Molmasse	291.70 g/mol	
Messtemperatur	100(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	C2/c	
Zelldimensionen	a = 15.342(3) Å	α = 90°.
	b = 6.977(1) Å	β = 119.174(4)°.
	c = 8.106(1) Å	γ = 90°.
Volumen	757.7(2) Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	2.557 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.950 mm ⁻¹	
F(000)	544	
Kristalldimensionen	0.41 x 0.37 x 0.32 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.04 bis 30.56°.	
Bereich der Indizes	-21 ≤ h ≤ 21, -9 ≤ k ≤ 7, -11 ≤ l ≤ 11	
Anzahl gemessene Reflexe	4468	
unabhängige Reflexe	1146 [R(int) = 0.0121]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.56°	98.6 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.808	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	1146 / 0 / 52	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.182	
Endgültiger Fehler R [$> 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0118, wR2 = 0.0285	
R (alle Daten)	R1 = 0.0122, wR2 = 0.0287	
Extinktionskoeffizient	0.0133(4)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.586 und -0.536 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für TeF_4 -dioxan. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	5000	10834(1)	2500	13(1)
F(1)	4463(1)	11550(2)	-159(1)	26(1)
F(2)	4045(1)	12622(2)	2282(1)	25(1)
O(1)	6705(1)	8831(2)	4346(2)	17(1)
C(1)	7578(1)	9207(2)	4164(2)	18(1)
C(2)	6528(1)	6796(2)	4268(2)	17(1)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für TeF_4 -dioxan.

Te(1)-F(2)#1	1.866(1)
Te(1)-F(2)	1.866(1)
Te(1)-F(1)#1	1.960(1)
Te(1)-F(1)	1.960(1)
Te(1)-O(1)	2.686(1)
O(1)-C(2)	1.441(2)
O(1)-C(1)	1.442(2)
C(1)-C(2)#2	1.512(2)
C(2)-C(1)#2	1.512(2)
F(2)#1-Te(1)-F(2)	96.06(7)
F(2)#1-Te(1)-F(1)#1	80.52(5)
F(2)-Te(1)-F(1)#1	79.84(4)
F(2)#1-Te(1)-F(1)	79.84(4)
F(2)-Te(1)-F(1)	80.52(5)
F(1)#1-Te(1)-F(1)	150.44(7)
F(2)#1-Te(1)-O(1)	77.82(4)
F(2)-Te(1)-O(1)	155.06(4)
F(1)#1-Te(1)-O(1)	75.32(4)
F(1)-Te(1)-O(1)	121.25(4)
C(2)-O(1)-C(1)	109.84(11)
C(2)-O(1)-Te(1)	112.14(8)
C(1)-O(1)-Te(1)	123.31(8)
O(1)-C(1)-C(2)#2	109.67(12)
O(1)-C(2)-C(1)#2	110.20(12)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $-x+1, y, -z+1/2$ #2 $-x+3/2, -y+3/2, -z+1$

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für TeF_4 -dioxan.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	13(1)	14(1)	10(1)	0	4(1)	0
F(1)	28(1)	32(1)	14(1)	7(1)	7(1)	-1(1)
F(2)	24(1)	21(1)	27(1)	0(1)	10(1)	8(1)
O(1)	13(1)	16(1)	20(1)	1(1)	7(1)	2(1)
C(1)	15(1)	19(1)	18(1)	3(1)	6(1)	0(1)
C(2)	13(1)	17(1)	19(1)	1(1)	5(1)	0(1)

Torsionswinkel [°] für TeF₄-dioxan

F(2)#1-Te(1)-O(1)-C(2)	-162.77(10)
F(2)-Te(1)-O(1)-C(2)	119.25(12)
F(1)#1-Te(1)-O(1)-C(2)	113.99(10)
F(1)-Te(1)-O(1)-C(2)	-92.77(10)
F(2)#1-Te(1)-O(1)-C(1)	-27.89(10)
F(2)-Te(1)-O(1)-C(1)	-105.87(13)
F(1)#1-Te(1)-O(1)-C(1)	-111.13(11)
F(1)-Te(1)-O(1)-C(1)	42.11(12)
C(2)-O(1)-C(1)-C(2)#2	-58.75(17)
Te(1)-O(1)-C(1)-C(2)#2	165.49(9)
C(1)-O(1)-C(2)-C(1)#2	59.07(16)
Te(1)-O(1)-C(2)-C(1)#2	-159.94(9)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 -x+1,y,-z+1/2 #2 -x+3/2,-y+3/2,-z+1

6.1.13. [TeF₄·(C₂H₅)₂O]_n

Bezeichnung	tef4eto	
Summenformel	C ₈ H ₂₀ F ₈ O ₂ Te ₂	
Molmasse	555.44 g/mol	
Messtemperatur	153(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 8.815(7) Å	α = 92.39(7)°.
	b = 9.743(12) Å	β = 105.18(6)°.
	c = 10.422(6) Å	γ = 105.26(8)°.
Volumen	827.5(13) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.229 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.602 mm ⁻¹	
F(000)	520	
Kristalldimensionen	0.21 x 0.19 x 0.17 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.04 bis 30.67°.	
Bereich der Indizes	-12 ≤ h ≤ 12, -9 ≤ k ≤ 13, -14 ≤ l ≤ 10	
Anzahl gemessene Reflexe	10116	
unabhängige Reflexe	4885 [R(int) = 0.0284]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.67°	95.4 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.757	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	4885 / 0 / 145	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.156	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0.1001, wR2 = 0.2623	
R (alle Daten)	R1 = 0.1132, wR2 = 0.2712	
Größte und kleinste Restelektronendichte	7.931 und -4.163 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{TeF}_4(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}]_n$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	12929(1)	9008(1)	8193(1)	18(1)
Te(2)	7899(1)	8210(1)	8796(1)	16(1)
F(1)	13767(13)	8508(17)	6807(12)	59(4)
F(2)	13370(30)	10850(15)	7725(17)	108(8)
F(3)	11071(16)	8610(30)	6746(15)	114(9)
F(4)	10870(50)	9386(16)	9245(15)	193(19)
F(5)	8731(14)	6803(18)	8212(19)	94(7)
F(6)	8314(19)	7510(15)	10431(13)	67(4)
F(7)	5941(11)	6673(11)	8215(11)	40(2)
F(8)	5770(50)	9235(18)	9307(15)	183(18)
O(1L)	12262(13)	6461(12)	8473(11)	30(2)
O(2L)	7309(15)	8510(20)	6443(14)	64(6)
C(1L)	12100(50)	4590(40)	7060(40)	94(10)
C(2L)	11230(40)	5290(30)	7690(30)	73(7)
C(3L)	13050(20)	6140(20)	9812(19)	42(4)
C(4L)	12450(40)	6570(30)	10810(30)	69(7)
C(5L)	6750(50)	6830(40)	5380(40)	93(10)
C(6L)	5340(40)	7080(40)	4520(40)	86(9)
C(7L)	7480(50)	10310(40)	6510(40)	87(9)
C(8L)	8680(50)	11220(40)	6470(40)	104(12)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für $[\text{TeF}_4(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}]_n$.

Te(1)-F(2)	1.848(13)
Te(1)-F(3)	1.852(12)
Te(1)-F(1)	1.887(10)
Te(1)-F(8)#1	2.41(4)
Te(1)-O(1L)	2.443(12)
Te(1)-F(4)	2.45(4)
Te(2)-F(6)	1.845(11)
Te(2)-F(5)	1.866(12)
Te(2)-F(7)	1.899(9)
Te(2)-O(2L)	2.417(12)
Te(2)-F(4)	2.47(4)
Te(2)-F(8)	2.50(4)
F(8)-Te(1)#2	2.41(4)
O(1L)-C(2L)	1.33(3)
O(1L)-C(3L)	1.47(2)
O(2L)-C(7L)	1.71(4)
O(2L)-C(5L)	1.81(4)
C(1L)-C(2L)	1.41(5)
C(3L)-C(4L)	1.38(3)
C(5L)-C(6L)	1.41(5)
C(7L)-C(8L)	1.20(5)
F(2)-Te(1)-F(3)	85.6(12)
F(2)-Te(1)-F(1)	87.5(8)
F(3)-Te(1)-F(1)	79.4(5)
F(2)-Te(1)-F(8)#1	93.7(10)
F(3)-Te(1)-F(8)#1	155.3(7)
F(1)-Te(1)-F(8)#1	76.0(6)
F(2)-Te(1)-O(1L)	171.8(6)
F(3)-Te(1)-O(1L)	88.6(9)

F(1)-Te(1)-O(1L)	85.8(6)
F(8)#1-Te(1)-O(1L)	89.1(5)
F(2)-Te(1)-F(4)	92.2(8)
F(3)-Te(1)-F(4)	78.0(6)
F(1)-Te(1)-F(4)	157.3(6)
F(8)#1-Te(1)-F(4)	126.6(7)
O(1L)-Te(1)-F(4)	92.3(4)
F(6)-Te(2)-F(5)	86.0(9)
F(6)-Te(2)-F(7)	88.2(6)
F(5)-Te(2)-F(7)	80.4(6)
F(6)-Te(2)-O(2L)	165.3(7)
F(5)-Te(2)-O(2L)	80.8(8)
F(7)-Te(2)-O(2L)	83.3(5)
F(6)-Te(2)-F(4)	89.4(6)
F(5)-Te(2)-F(4)	75.3(8)
F(7)-Te(2)-F(4)	155.7(7)
O(2L)-Te(2)-F(4)	93.5(5)
F(6)-Te(2)-F(8)	92.0(7)
F(5)-Te(2)-F(8)	156.5(8)
F(7)-Te(2)-F(8)	76.1(7)
O(2L)-Te(2)-F(8)	97.5(5)
F(4)-Te(2)-F(8)	128.1(8)
Te(1)-F(4)-Te(2)	132.8(6)
Te(1)#2-F(8)-Te(2)	134.6(6)
C(2L)-O(1L)-C(3L)	112.3(18)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	132.9(15)
C(3L)-O(1L)-Te(1)	114.6(10)
C(7L)-O(2L)-C(5L)	146.4(19)
C(7L)-O(2L)-Te(2)	100.8(15)
C(5L)-O(2L)-Te(2)	112.6(15)
O(1L)-C(2L)-C(1L)	110(3)
C(4L)-C(3L)-O(1L)	113.9(19)
C(6L)-C(5L)-O(2L)	94(3)
C(8L)-C(7L)-O(2L)	125(4)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome
 #1 $x+1,y,z$ #2 $x-1,y,z$

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{TeF}_4 \cdot (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}]_n$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	12(1)	23(1)	21(1)	0(1)	6(1)	5(1)
Te(2)	9(1)	19(1)	19(1)	-1(1)	5(1)	2(1)
F(1)	25(5)	102(11)	44(6)	-36(7)	10(4)	15(6)
F(2)	230(30)	30(7)	70(10)	22(7)	68(14)	20(11)
F(3)	30(6)	250(30)	55(8)	-68(12)	-15(5)	69(11)
F(4)	420(50)	26(7)	31(7)	-5(6)	-13(15)	-37(15)
F(5)	22(5)	101(12)	133(14)	-92(11)	-17(7)	29(6)
F(6)	77(9)	52(7)	46(7)	32(6)	-5(6)	-8(7)
F(7)	23(4)	41(5)	45(6)	-9(4)	17(4)	-15(4)
F(8)	440(50)	42(9)	27(7)	-6(6)	-3(15)	77(17)
O(1L)	23(5)	32(6)	33(5)	7(5)	4(4)	9(4)
O(2L)	18(5)	147(17)	35(7)	43(9)	10(5)	30(8)

6.1.14. [TeF₄·toluol]_n

Bezeichnung	tef4tl	
Summenformel	C ₁₄ H ₁₆ F ₈ Te ₂	
Molmasse	591.47 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 7.583(2) Å	α = 107.632(4)°.
	b = 10.446(2) Å	β = 96.929(4)°.
	c = 13.131(3) Å	γ = 108.243(4)°.
Volumen	914.4(3) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.148 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.260 mm ⁻¹	
F(000)	552	
Kristalldimensionen	0.25 x 0.18 x 0.14 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.68 bis 30.55°.	
Bereich der Indizes	-10 ≤ h ≤ 10, -12 ≤ k ≤ 14, -18 ≤ l ≤ 18	
Anzahl gemessene Reflexe	11421	
unabhängige Reflexe	5419 [R(int) = 0.0531]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.55°	97.0 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.803	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	5419 / 0 / 222	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.123	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R1 = 0.0442, wR2 = 0.1047	
R (alle Daten)	R1 = 0.0609, wR2 = 0.1096	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.843 und -1.865 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für [TeF₄·toluol]_n. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	4944(1)	11211(1)	1681(1)	19(1)
Te(2)	3417(1)	8326(1)	3399(1)	18(1)
F(1)	5000	10000	0	39(1)
F(2)	4161(5)	12161(4)	2900(3)	30(1)
F(3)	4332(6)	12416(4)	1017(3)	33(1)
F(4)	2409(5)	9994(4)	1116(3)	30(1)
F(5)	4755(5)	9556(4)	2441(3)	32(1)
F(6)	5000	10000	5000	47(2)
F(7)	1713(6)	7482(5)	4158(3)	39(1)
F(8)	2155(5)	9594(4)	3512(3)	28(1)
F(9)	1523(6)	7146(4)	2102(3)	34(1)
C(1L)	6291(12)	6777(9)	2339(6)	41(2)
C(2L)	4713(12)	5665(8)	2307(7)	49(2)
C(3L)	4300(12)	5477(9)	3240(9)	54(2)
C(4L)	5493(15)	6411(11)	4248(8)	59(3)
C(5L)	7102(13)	7527(9)	4308(7)	53(2)
C(6L)	7488(10)	7704(8)	3335(8)	45(2)
C(7L)	6720(20)	6993(17)	1294(9)	111(6)

C(8L)	9118(8)	3204(7)	1594(5)	27(1)
C(9L)	8675(9)	4019(7)	2517(5)	31(1)
C(10L)	8718(10)	3650(9)	3457(5)	43(2)
C(11L)	9215(10)	2497(10)	3478(6)	42(2)
C(12L)	9652(9)	1693(8)	2570(6)	39(2)
C(13L)	9627(8)	2065(7)	1643(6)	30(1)
C(14L)	9074(12)	3608(9)	600(6)	49(2)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für [TeF₄·toluol]_n.

Te(1)-F(4)	1.849(3)
Te(1)-F(3)	1.869(3)
Te(1)-F(2)	1.880(3)
Te(1)-F(1)	2.1995(5)
Te(1)-F(5)	2.221(3)
Te(2)-F(8)	1.844(3)
Te(2)-F(9)	1.874(4)
Te(2)-F(7)	1.890(3)
Te(2)-F(5)	2.175(3)
Te(2)-F(6)	2.1839(5)
Te(2)-C(3L)	3.202(7)
Te(2)-C(2L)	3.222(7)
Te(2)-C(4L)	3.260(7)
Te(2)-C(1L)	3.298(6)
Te(2)-C(5L)	3.345(7)
Te(2)-C(6L)	3.353(7)
F(1)-Te(1)#1	2.1995(5)
F(6)-Te(2)#2	2.1839(5)
C(1L)-C(6L)	1.366(11)
C(1L)-C(2L)	1.368(12)
C(1L)-C(7L)	1.513(10)
C(2L)-C(3L)	1.354(12)
C(3L)-C(4L)	1.378(13)
C(4L)-C(5L)	1.373(13)
C(5L)-C(6L)	1.397(12)
C(8L)-C(13L)	1.377(9)
C(8L)-C(9L)	1.400(9)
C(8L)-C(14L)	1.489(8)
C(9L)-C(10L)	1.400(10)
C(10L)-C(11L)	1.377(11)
C(11L)-C(12L)	1.379(11)
C(12L)-C(13L)	1.385(9)
F(4)-Te(1)-F(3)	86.41(17)
F(4)-Te(1)-F(2)	86.52(16)
F(3)-Te(1)-F(2)	86.94(16)
F(4)-Te(1)-F(1)	78.96(11)
F(3)-Te(1)-F(1)	83.02(12)
F(2)-Te(1)-F(1)	162.80(12)
F(4)-Te(1)-F(5)	78.05(15)
F(3)-Te(1)-F(5)	163.08(15)
F(2)-Te(1)-F(5)	85.49(14)
F(1)-Te(1)-F(5)	100.30(10)
F(8)-Te(2)-F(9)	85.30(17)
F(8)-Te(2)-F(7)	85.62(16)
F(9)-Te(2)-F(7)	87.19(18)
F(8)-Te(2)-F(5)	78.64(14)
F(9)-Te(2)-F(5)	86.44(16)

F(7)-Te(2)-F(5)	163.44(15)
F(8)-Te(2)-F(6)	78.48(12)
F(9)-Te(2)-F(6)	162.95(13)
F(7)-Te(2)-F(6)	86.39(14)
F(5)-Te(2)-F(6)	95.38(11)
F(8)-Te(2)-C(3L)	161.51(18)
F(9)-Te(2)-C(3L)	85.5(2)
F(7)-Te(2)-C(3L)	77.9(2)
F(5)-Te(2)-C(3L)	116.72(19)
F(6)-Te(2)-C(3L)	108.5(2)
F(8)-Te(2)-C(2L)	159.30(19)
F(9)-Te(2)-C(2L)	74.95(19)
F(7)-Te(2)-C(2L)	99.3(2)
F(5)-Te(2)-C(2L)	93.8(2)
F(6)-Te(2)-C(2L)	121.71(15)
C(3L)-Te(2)-C(2L)	24.3(2)
F(8)-Te(2)-C(4L)	156.17(18)
F(9)-Te(2)-C(4L)	110.0(2)
F(7)-Te(2)-C(4L)	77.28(19)
F(5)-Te(2)-C(4L)	119.28(18)
F(6)-Te(2)-C(4L)	83.9(2)
C(3L)-Te(2)-C(4L)	24.6(2)
C(2L)-Te(2)-C(4L)	42.8(2)
F(8)-Te(2)-C(1L)	152.47(16)
F(9)-Te(2)-C(1L)	88.15(19)
F(7)-Te(2)-C(1L)	120.78(18)
F(5)-Te(2)-C(1L)	74.28(16)
F(6)-Te(2)-C(1L)	108.68(15)
C(3L)-Te(2)-C(1L)	42.8(2)
C(2L)-Te(2)-C(1L)	24.2(2)
C(4L)-Te(2)-C(1L)	49.71(18)
F(8)-Te(2)-C(5L)	150.42(18)
F(9)-Te(2)-C(5L)	124.15(18)
F(7)-Te(2)-C(5L)	97.5(2)
F(5)-Te(2)-C(5L)	98.7(2)
F(6)-Te(2)-C(5L)	72.42(13)
C(3L)-Te(2)-C(5L)	42.6(2)
C(2L)-Te(2)-C(5L)	49.3(2)
C(4L)-Te(2)-C(5L)	23.9(2)
C(1L)-Te(2)-C(5L)	42.4(2)
F(8)-Te(2)-C(6L)	149.08(17)
F(9)-Te(2)-C(6L)	111.8(2)
F(7)-Te(2)-C(6L)	119.48(18)
F(5)-Te(2)-C(6L)	77.08(17)
F(6)-Te(2)-C(6L)	85.03(16)
C(3L)-Te(2)-C(6L)	49.33(19)
C(2L)-Te(2)-C(6L)	41.9(2)
C(4L)-Te(2)-C(6L)	42.3(2)
C(1L)-Te(2)-C(6L)	23.7(2)
C(5L)-Te(2)-C(6L)	24.1(2)
Te(1)#1-F(1)-Te(1)	180.000(11)
Te(2)-F(5)-Te(1)	150.57(18)
Te(2)-F(6)-Te(2)#2	180.000(1)
C(6L)-C(1L)-C(2L)	119.0(7)
C(6L)-C(1L)-C(7L)	119.9(10)
C(2L)-C(1L)-C(7L)	121.0(10)
C(6L)-C(1L)-Te(2)	80.4(4)
C(2L)-C(1L)-Te(2)	74.8(4)
C(7L)-C(1L)-Te(2)	114.9(5)
C(3L)-C(2L)-C(1L)	121.5(8)
C(3L)-C(2L)-Te(2)	77.0(4)
C(1L)-C(2L)-Te(2)	81.0(4)

C(2L)-C(3L)-C(4L)	119.9(8)
C(2L)-C(3L)-Te(2)	78.7(4)
C(4L)-C(3L)-Te(2)	80.0(4)
C(5L)-C(4L)-C(3L)	120.1(8)
C(5L)-C(4L)-Te(2)	81.5(4)
C(3L)-C(4L)-Te(2)	75.3(4)
C(4L)-C(5L)-C(6L)	118.9(7)
C(4L)-C(5L)-Te(2)	74.6(4)
C(6L)-C(5L)-Te(2)	78.3(4)
C(1L)-C(6L)-C(5L)	120.6(7)
C(1L)-C(6L)-Te(2)	75.9(4)
C(5L)-C(6L)-Te(2)	77.6(4)
C(13L)-C(8L)-C(9L)	118.7(6)
C(13L)-C(8L)-C(14L)	121.8(6)
C(9L)-C(8L)-C(14L)	119.4(7)
C(8L)-C(9L)-C(10L)	119.9(6)
C(11L)-C(10L)-C(9L)	120.1(6)
C(10L)-C(11L)-C(12L)	120.1(6)
C(11L)-C(12L)-C(13L)	119.9(7)
C(8L)-C(13L)-C(12L)	121.3(6)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,-y+2,-z #2 -x+1,-y+2,-z+1

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{TeF}_4 \cdot \text{toluol}]_n$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^2 U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	18(1)	18(1)	21(1)	7(1)	7(1)	6(1)
Te(2)	17(1)	18(1)	18(1)	6(1)	5(1)	4(1)
F(1)	43(3)	38(3)	26(3)	2(2)	13(2)	11(3)
F(2)	32(2)	28(2)	32(2)	8(2)	16(2)	12(2)
F(3)	41(2)	29(2)	35(2)	17(2)	6(2)	17(2)
F(4)	19(2)	28(2)	32(2)	5(2)	6(1)	2(2)
F(5)	31(2)	33(2)	45(2)	24(2)	20(2)	16(2)
F(6)	48(4)	39(3)	42(3)	-5(3)	-4(3)	23(3)
F(7)	39(2)	50(3)	48(2)	34(2)	26(2)	19(2)
F(8)	25(2)	30(2)	33(2)	11(2)	9(2)	14(2)
F(9)	35(2)	27(2)	25(2)	3(2)	-6(2)	2(2)
C(1L)	53(5)	56(5)	36(4)	21(4)	22(4)	42(4)
C(2L)	43(4)	30(4)	56(5)	-10(4)	-6(4)	23(4)
C(3L)	43(5)	29(4)	102(8)	30(5)	26(5)	19(4)
C(4L)	94(8)	79(7)	59(6)	53(6)	46(6)	68(7)
C(5L)	54(5)	46(5)	45(5)	-9(4)	-21(4)	37(4)
C(6L)	23(3)	34(4)	84(6)	23(4)	13(4)	14(3)
C(7L)	176(13)	203(15)	81(8)	103(10)	101(9)	160(13)
C(8L)	21(3)	29(3)	27(3)	13(3)	2(2)	2(2)
C(9L)	19(3)	24(3)	34(3)	2(3)	-3(2)	0(2)
C(10L)	24(3)	67(5)	17(3)	-2(3)	2(3)	8(3)
C(11L)	26(3)	74(6)	33(4)	32(4)	5(3)	14(4)
C(12L)	27(3)	49(4)	55(5)	34(4)	16(3)	17(3)
C(13L)	19(3)	33(3)	38(4)	16(3)	12(3)	4(3)
C(14L)	49(5)	58(5)	41(4)	37(4)	7(4)	4(4)

6.1.15. TeCl₄·(CH₃CN)₂

Bezeichnung	tecl4ac	
Summenformel	C ₄ H ₆ Cl ₄ N ₂ Te	
Molmasse	351.51 g/mol	
Messtemperatur	123(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 5.933(1) Å	α = 88.750(4)°
	b = 7.452(2) Å	β = 88.661(4)°
	c = 12.619(2) Å	γ = 84.977(4)°
Volumen	555.50(18) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.102 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.586 mm ⁻¹	
F(000)	328	
Kristalldimensionen	0.38 x 0.25 x 0.24 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.61 bis 30.57°.	
Bereich der Indizes	-8 ≤ h ≤ 6, -10 ≤ k ≤ 10, -17 ≤ l ≤ 17	
Anzahl gemessene Reflexe	6407	
unabhängige Reflexe	3295 [R(int) = 0.0152]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.57°	96.4 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.692	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	3295 / 0 / 102	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.041	
Endgültiger Fehler R [$l > 2\sigma(l)$]	R ₁ = 0.0195, wR ₂ = 0.0497	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0218, wR ₂ = 0.0508	
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.234 und -0.530 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für TeCl₄·(CH₃CN)₂. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	753(1)	2471(1)	7498(1)	18(1)
Cl(1)	-1481(1)	160(1)	6732(1)	29(1)
Cl(2)	2712(1)	4890(1)	8287(1)	31(1)
Cl(3)	-1564(1)	2480(1)	9001(1)	26(1)
Cl(4)	-1497(1)	4683(1)	6604(1)	28(1)
N(1L)	3327(3)	-144(3)	8614(2)	29(1)
N(2L)	3228(4)	2651(3)	5643(2)	34(1)
C(1L)	4888(4)	-1099(3)	8802(2)	23(1)
C(2L)	6869(4)	-2322(3)	9047(2)	28(1)
C(3L)	4646(4)	2510(3)	5021(2)	25(1)
C(4L)	6445(4)	2341(3)	4224(2)	32(1)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{CH}_3\text{CN})_2$.

Te(1)-Cl(3)	2.3154(6)
Te(1)-Cl(4)	2.3186(6)
Te(1)-Cl(2)	2.4674(6)
Te(1)-Cl(1)	2.4879(6)
Te(1)-N(2L)	2.741(2)
Te(1)-N(1L)	2.752(2)
N(1L)-C(1L)	1.144(3)
N(2L)-C(3L)	1.137(3)
C(1L)-C(2L)	1.458(3)
C(3L)-C(4L)	1.449(3)
Cl(3)-Te(1)-Cl(4)	94.79(2)
Cl(3)-Te(1)-Cl(2)	88.21(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(2)	88.18(2)
Cl(3)-Te(1)-Cl(1)	89.15(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(1)	88.96(2)
Cl(2)-Te(1)-Cl(1)	175.936(19)
Cl(3)-Te(1)-N(2L)	175.30(5)
Cl(4)-Te(1)-N(2L)	80.53(5)
Cl(2)-Te(1)-N(2L)	92.17(5)
Cl(1)-Te(1)-N(2L)	90.21(5)
Cl(3)-Te(1)-N(1L)	83.37(5)
Cl(4)-Te(1)-N(1L)	178.16(4)
Cl(2)-Te(1)-N(1L)	91.74(5)
Cl(1)-Te(1)-N(1L)	91.02(5)
N(2L)-Te(1)-N(1L)	101.30(6)
C(1L)-N(1L)-Te(1)	156.64(18)
C(3L)-N(2L)-Te(1)	163.35(19)
N(1L)-C(1L)-C(2L)	179.7(3)
N(2L)-C(3L)-C(4L)	179.6(3)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{CH}_3\text{CN})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	17(1)	18(1)	17(1)	2(1)	0(1)	0(1)
Cl(1)	32(1)	26(1)	28(1)	-4(1)	-3(1)	-6(1)
Cl(2)	33(1)	30(1)	31(1)	2(1)	-6(1)	-13(1)
Cl(3)	24(1)	30(1)	23(1)	-1(1)	6(1)	-3(1)
Cl(4)	28(1)	26(1)	29(1)	4(1)	-7(1)	5(1)
N(1L)	30(1)	28(1)	29(1)	3(1)	1(1)	1(1)
N(2L)	31(1)	42(1)	28(1)	5(1)	3(1)	2(1)
C(1L)	29(1)	21(1)	18(1)	0(1)	0(1)	-4(1)
C(2L)	30(1)	24(1)	28(1)	1(1)	-5(1)	2(1)
C(3L)	28(1)	24(1)	22(1)	3(1)	-2(1)	0(1)
C(4L)	35(1)	33(1)	27(1)	1(1)	10(1)	2(1)

Torsionswinkel [°] für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{CH}_3\text{CN})_2$.

Cl(3)-Te(1)-N(1L)-C(1L)	-167.5(4)
Cl(4)-Te(1)-N(1L)-C(1L)	-167.3(11)
Cl(2)-Te(1)-N(1L)-C(1L)	-79.5(4)
Cl(1)-Te(1)-N(1L)-C(1L)	103.5(4)
N(2L)-Te(1)-N(1L)-C(1L)	13.0(4)
Cl(3)-Te(1)-N(2L)-C(3L)	170.3(4)
Cl(4)-Te(1)-N(2L)-C(3L)	163.6(7)
Cl(2)-Te(1)-N(2L)-C(3L)	75.8(7)
Cl(1)-Te(1)-N(2L)-C(3L)	-107.5(7)
N(1L)-Te(1)-N(2L)-C(3L)	-16.4(7)
Te(1)-N(1L)-C(1L)-C(2L)	-175(100)
Te(1)-N(2L)-C(3L)-C(4L)	-162(100)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

6.1.16. $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{dme})_2$

Bezeichnung	teclm	
Summenformel	$\text{C}_8 \text{H}_{20} \text{Cl}_4 \text{O}_4 \text{Te}$	
Molmasse	449.64 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	triklin	
Raumgruppe	P-1	
Zelldimensionen	a = 7.790(2) Å	$\alpha = 72.544(6)^\circ$
	b = 8.967(2) Å	$\beta = 83.443(6)^\circ$
	c = 13.763(4) Å	$\gamma = 66.126(5)^\circ$
Volumen	838.6(4) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	1.781 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	2.410 mm ⁻¹	
F(000)	440	
Kristalldimensionen	0.1 x 0.05 x 0.03 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.59 bis 30.54°	
Bereich der Indizes	-11 ≤ h ≤ 8, -12 ≤ k ≤ 12, -16 ≤ l ≤ 19	
Anzahl gemessene Reflexe	10420	
unabhängige Reflexe	4963 [R(int) = 0.0114]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.54°	96.9 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.885	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	4963 / 0 / 158	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.047	
Endgültiger Fehler R [$> 2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0154, wR ₂ = 0.0396	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0171, wR ₂ = 0.0407	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.508 und -0.714 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)
für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{dme})_2$. $U(\text{eq})$ ist definiert als $1/3$ des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	5774(1)	3050(1)	2904(1)	23(1)
Cl(1)	3693(1)	6084(1)	2198(1)	46(1)
Cl(2)	7708(1)	-49(1)	3482(1)	37(1)
Cl(3)	3296(1)	2688(1)	3948(1)	37(1)
Cl(4)	4647(1)	2485(1)	1614(1)	35(1)
O(1L)	6806(1)	2865(1)	4826(1)	32(1)
O(2L)	8099(2)	4899(1)	3138(1)	38(1)
O(3L)	11497(2)	1410(1)	342(1)	47(1)
O(4L)	8173(1)	3201(1)	1505(1)	34(1)
C(1L)	6984(2)	1381(2)	5647(1)	41(1)
C(2L)	8223(2)	3457(2)	4900(1)	37(1)
C(3L)	7866(2)	5127(2)	4124(1)	35(1)
C(4L)	8053(3)	6409(2)	2385(1)	51(1)
C(5L)	12488(3)	-8(2)	-52(2)	57(1)
C(6L)	11210(2)	903(2)	1402(1)	36(1)
C(7L)	10131(2)	2443(2)	1772(1)	32(1)
C(8L)	7715(2)	4304(2)	487(1)	38(1)

Bindungslängen [\AA] und Winkel [$^\circ$] für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Te(1)-Cl(4)	2.3313(6)
Te(1)-Cl(3)	2.3431(6)
Te(1)-Cl(1)	2.4851(7)
Te(1)-Cl(2)	2.4866(7)
Te(1)-O(4L)	2.5380(11)
Te(1)-O(1L)	2.7899(12)
Te(1)-O(2L)	3.0030(12)
Te(1)-O(3L)	5.3554(15)
O(1L)-C(2L)	1.4288(18)
O(1L)-C(1L)	1.4325(16)
O(2L)-C(3L)	1.4121(18)
O(2L)-C(4L)	1.4272(19)
O(3L)-C(6L)	1.4128(18)
O(3L)-C(5L)	1.425(2)
O(4L)-C(7L)	1.4362(16)
O(4L)-C(8L)	1.4376(16)
C(2L)-C(3L)	1.494(2)
C(6L)-C(7L)	1.503(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(3)	89.78(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(1)	87.44(2)
Cl(3)-Te(1)-Cl(1)	88.47(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(2)	86.78(2)
Cl(3)-Te(1)-Cl(2)	90.932(19)
Cl(1)-Te(1)-Cl(2)	174.187(14)
Cl(4)-Te(1)-O(4L)	77.18(3)
Cl(3)-Te(1)-O(4L)	166.85(3)
Cl(1)-Te(1)-O(4L)	92.59(3)
Cl(2)-Te(1)-O(4L)	86.69(3)
Cl(4)-Te(1)-O(1L)	161.42(2)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)	76.32(3)

Cl(1)-Te(1)-O(1L)	104.20(3)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)	81.26(2)
O(4L)-Te(1)-O(1L)	115.99(4)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)	139.14(2)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)	126.59(3)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)	76.93(3)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)	107.95(3)
O(4L)-Te(1)-O(2L)	66.28(4)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	58.89(3)
Cl(4)-Te(1)-O(3L)	73.87(3)
Cl(3)-Te(1)-O(3L)	155.447(18)
Cl(1)-Te(1)-O(3L)	108.49(2)
Cl(2)-Te(1)-O(3L)	70.372(18)
O(4L)-Te(1)-O(3L)	16.63(3)
O(1L)-Te(1)-O(3L)	114.70(3)
O(2L)-Te(1)-O(3L)	75.78(3)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	110.57(11)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	118.89(8)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	118.59(9)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	111.01(12)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	109.92(8)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	121.09(10)
C(6L)-O(3L)-C(5L)	111.94(12)
C(6L)-O(3L)-Te(1)	43.48(7)
C(5L)-O(3L)-Te(1)	135.75(10)
C(7L)-O(4L)-C(8L)	115.43(10)
C(7L)-O(4L)-Te(1)	119.07(8)
C(8L)-O(4L)-Te(1)	124.09(8)
O(1L)-C(2L)-C(3L)	109.90(12)
O(2L)-C(3L)-C(2L)	109.42(12)
O(3L)-C(6L)-C(7L)	109.64(12)
O(4L)-C(7L)-C(6L)	113.13(12)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalent Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	22(1)	21(1)	25(1)	-6(1)	0(1)	-9(1)
Cl(1)	44(1)	25(1)	56(1)	-4(1)	-7(1)	-4(1)
Cl(2)	39(1)	24(1)	40(1)	-5(1)	0(1)	-6(1)
Cl(3)	31(1)	43(1)	41(1)	-16(1)	12(1)	-20(1)
Cl(4)	30(1)	46(1)	36(1)	-16(1)	-2(1)	-18(1)
O(1L)	35(1)	29(1)	31(1)	-5(1)	-4(1)	-14(1)
O(2L)	53(1)	33(1)	36(1)	-13(1)	5(1)	-23(1)
O(3L)	62(1)	34(1)	37(1)	-11(1)	16(1)	-15(1)
O(4L)	25(1)	47(1)	26(1)	-1(1)	-1(1)	-16(1)
C(1L)	51(1)	35(1)	32(1)	-2(1)	-2(1)	-15(1)
C(2L)	35(1)	41(1)	37(1)	-10(1)	-7(1)	-15(1)
C(3L)	39(1)	35(1)	40(1)	-16(1)	-1(1)	-18(1)
C(4L)	80(1)	44(1)	44(1)	-11(1)	7(1)	-39(1)
C(5L)	71(1)	41(1)	50(1)	-19(1)	17(1)	-15(1)
C(6L)	38(1)	35(1)	36(1)	-8(1)	5(1)	-16(1)
C(7L)	24(1)	41(1)	34(1)	-11(1)	-1(1)	-14(1)
C(8L)	37(1)	45(1)	27(1)	-1(1)	-2(1)	-19(1)

Torsionswinkel [°] für $\text{TeCl}_4 \cdot (\text{dme})_2$.

Cl(4)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	154.64(8)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-162.78(9)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-77.94(9)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	104.11(9)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	22.15(10)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-13.09(9)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	40.52(10)
Cl(4)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	15.38(14)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	57.96(10)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	142.81(10)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-35.15(10)
O(4L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-117.11(10)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-152.34(11)
O(3L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-98.74(10)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	164.75(7)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	16.45(10)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	94.54(9)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-88.73(9)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-166.69(9)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-21.19(8)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-152.22(9)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	33.15(13)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-115.15(11)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-37.06(11)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	139.67(11)
O(4L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	61.72(12)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-152.79(12)
O(3L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	76.18(12)
Cl(4)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-129.07(11)
Cl(3)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-79.06(12)
Cl(1)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	149.31(11)
Cl(2)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	-36.72(11)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	131.65(16)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	33.31(12)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(6L)	78.62(11)
Cl(4)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-56.79(16)
Cl(3)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-6.78(18)
Cl(1)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-138.41(16)
Cl(2)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	35.56(16)
O(4L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	-156.1(2)
O(1L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	105.59(16)
O(2L)-Te(1)-O(3L)-C(5L)	150.90(17)
Cl(4)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-137.96(10)
Cl(3)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-130.37(10)
Cl(1)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	135.26(9)
Cl(2)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-50.51(9)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	28.10(10)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	60.75(9)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(7L)	-61.48(11)
Cl(4)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	56.26(11)
Cl(3)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	63.84(17)
Cl(1)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-30.53(11)
Cl(2)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	143.70(11)
O(1L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-137.69(11)
O(2L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	-105.04(12)
O(3L)-Te(1)-O(4L)-C(8L)	132.73(17)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	-172.48(12)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)	45.26(15)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	-171.11(14)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)	52.20(13)

O(1L)-C(2L)-C(3L)-O(2L)	-66.34(16)
C(5L)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	-178.96(15)
Te(1)-O(3L)-C(6L)-C(7L)	-44.73(8)
C(8L)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	-81.56(15)
Te(1)-O(4L)-C(7L)-C(6L)	111.45(11)
O(3L)-C(6L)-C(7L)-O(4L)	75.16(15)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalent Atome:

6.1.17. TeCl₄-dioxan

Bezeichnung	birg1	
Summenformel	C ₄ H ₈ Cl ₄ O ₂ Te	
Molmasse	357.50 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁	
Zelldimensionen	a = 6.168(2) Å	α = 90°.
	b = 12.863(5) Å	β = 90.181(6)°.
	c = 6.684(2) Å	γ = 90°.
Volumen	530.3(3) Å ³	
Z	2	
Dichte (berechnet)	2.239 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	3.767 mm ⁻¹	
F(000)	336	
Kristalldimensionen	0.23 x 0.19 x 0.17 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	3.05 bis 30.48°.	
Bereich der Indizes	-8 ≤ h ≤ 7, -18 ≤ k ≤ 18, -9 ≤ l ≤ 7	
Anzahl gemessene Reflexe	6477	
unabhängige Reflexe	3115 [R(int) = 0.0244]	
Vollständigkeit zu Theta = 30.48°	98.0 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.661	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	3115 / 1 / 101	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.219	
Endgültiger Fehler R [$> 2\sigma(I)$]	R1 = 0.0518, wR2 = 0.1401	
R (alle Daten)	R1 = 0.0564, wR2 = 0.1429	
Flack-Parameter	0.57(8)	
Größte und kleinste Restelektronendichte	5.516 und -1.066 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für TeCl₄-dioxan. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	7836(1)	3271(2)	-2538(1)	21(1)
Cl(1)	5064(3)	3276(6)	-5240(3)	33(1)
Cl(2)	10767(3)	3288(6)	18(3)	37(1)
Cl(3)	9646(11)	1933(2)	-4282(9)	36(1)
Cl(4)	9667(8)	4556(2)	-4253(9)	26(1)
O(1L)	5981(19)	4873(8)	-922(15)	23(2)

O(2L)	6030(20)	1603(9)	-874(18)	34(3)
C(1L)	4900(30)	5662(12)	-2030(20)	33(4)
C(2L)	6960(30)	5333(13)	971(18)	28(3)
C(3L)	5050(40)	806(17)	-2130(30)	48(5)
C(4L)	6720(30)	1183(15)	850(30)	47(5)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für TeCl₄-dioxan.

Te(1)-Cl(4)	2.309(4)
Te(1)-Cl(3)	2.361(5)
Te(1)-Cl(1)	2.4827(17)
Te(1)-Cl(2)	2.4836(18)
Te(1)-O(1L)	2.595(11)
Te(1)-O(2L)	2.661(10)
O(1L)-C(1L)	1.421(17)
O(1L)-C(2L)	1.519(16)
O(2L)-C(4L)	1.34(2)
O(2L)-C(3L)	1.46(2)
C(1L)-C(4L)#1	1.44(3)
C(2L)-C(3L)#1	1.58(2)
C(3L)-C(2L)#2	1.58(2)
C(4L)-C(1L)#2	1.44(3)
Cl(4)-Te(1)-Cl(3)	92.52(7)
Cl(4)-Te(1)-Cl(1)	88.50(19)
Cl(3)-Te(1)-Cl(1)	88.2(2)
Cl(4)-Te(1)-Cl(2)	88.78(19)
Cl(3)-Te(1)-Cl(2)	90.10(19)
Cl(1)-Te(1)-Cl(2)	176.74(10)
Cl(4)-Te(1)-O(1L)	81.7(3)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)	173.9(3)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)	89.8(2)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)	91.6(2)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)	172.0(3)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)	79.5(3)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)	91.1(3)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)	91.4(3)
O(1L)-Te(1)-O(2L)	106.31(16)
C(1L)-O(1L)-C(2L)	109.9(10)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	123.9(9)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	118.8(7)
C(4L)-O(2L)-C(3L)	110.0(14)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	123.5(10)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	120.0(10)
C(4L)#1-C(1L)-O(1L)	111.9(16)
O(1L)-C(2L)-C(3L)#1	104.6(13)
O(2L)-C(3L)-C(2L)#2	108.1(15)
O(2L)-C(4L)-C(1L)#2	116.1(15)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 -x+1,y+1/2,-z #2 -x+1,y-1/2,-z

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für TeCl_4 -dioxan.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	28(1)	11(1)	24(1)	0(1)	1(1)	1(1)
Cl(1)	33(1)	26(1)	41(1)	-4(3)	-7(1)	3(3)
Cl(2)	49(1)	26(1)	38(1)	-2(3)	-12(1)	5(3)
Cl(3)	51(2)	22(2)	34(2)	-7(1)	2(2)	3(2)
Cl(4)	25(2)	16(2)	38(2)	6(1)	4(2)	-8(1)
O(1L)	35(5)	20(4)	15(4)	-2(3)	-20(4)	3(4)
O(2L)	48(6)	14(4)	41(6)	5(4)	21(5)	-11(4)
C(1L)	50(8)	28(6)	22(7)	-10(4)	-19(6)	16(5)
C(2L)	32(6)	39(7)	14(4)	-9(4)	-5(4)	15(5)
C(3L)	73(12)	50(9)	21(6)	-8(6)	19(7)	-32(8)
C(4L)	52(9)	29(7)	59(10)	11(6)	-32(7)	-16(6)

Torsionswinkel [°] für TeCl_4 -dioxan

Cl(4)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	56.1(12)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	39(3)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-32.4(13)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	144.6(12)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(1L)	-123.5(13)
Cl(4)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-90.8(11)
Cl(3)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-108(2)
Cl(1)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-179.3(10)
Cl(2)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	-2.2(11)
O(2L)-Te(1)-O(1L)-C(2L)	89.7(11)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	97(3)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	95.7(16)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-176.3(16)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	5.8(16)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(4L)	-86.2(16)
Cl(4)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-52(3)
Cl(3)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-53.3(14)
Cl(1)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	34.7(14)
Cl(2)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	-143.1(14)
O(1L)-Te(1)-O(2L)-C(3L)	124.8(15)
C(2L)-O(1L)-C(1L)-C(4L)#1	-55.7(16)
Te(1)-O(1L)-C(1L)-C(4L)#1	154.9(12)
C(1L)-O(1L)-C(2L)-C(3L)#1	58.8(16)
Te(1)-O(1L)-C(2L)-C(3L)#1	-150.0(11)
C(4L)-O(2L)-C(3L)-C(2L)#2	61(2)
Te(1)-O(2L)-C(3L)-C(2L)#2	-146.6(12)
C(3L)-O(2L)-C(4L)-C(1L)#2	-58(2)
Te(1)-O(2L)-C(4L)-C(1L)#2	150.6(13)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 $-x+1, y+1/2, -z$ #2 $-x+1, y-1/2, -z$

6.1.18. [H(OC₄H₁₀)₂].[Te₃Cl₁₃]

Bezeichnung	tecltol	
Summenformel	C ₈ H ₂₁ Cl ₁₃ O ₂ Te ₃	
Molmasse	992.90 g/mol	
Messtemperatur	173(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /n	
Zelldimensionen	a = 8.615(2) Å	α = 90°.
	b = 19.927(5) Å	β = 95.86(2)°.
	c = 34.941(7) Å	γ = 90°.
Volumen	5967(2) Å ³	
Z	8	
Dichte (berechnet)	2.210 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	4.084 mm ⁻¹	
F(000)	3696	
Kristalldimensionen	0.25 x 0.14 x 0.10 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	1.17 bis 26.03°.	
Bereich der Indizes	-10 ≤ h ≤ 10, 0 ≤ k ≤ 24, 0 ≤ l ≤ 43	
Anzahl gemessene Reflexe	11722	
unabhängige Reflexe	11722 [R(int) = 0.0000]	
Vollständigkeit zu Theta = 26.03°	99.3 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.748	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	
Reflexe / restraints / Parameter	11722 / 0 / 485	
Goodness-of-fit gegen F ²	1.075	
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	R ₁ = 0.0341, wR ₂ = 0.0600	
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0627, wR ₂ = 0.0691	
Größte und kleinste Restelektronendichte	0.680 und -0.765 e.Å ⁻³	

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für [H(OC₄H₁₀)₂].[Te₃Cl₁₃]. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	7617(1)	6735(1)	8245(1)	22(1)
Te(2)	4176(1)	6787(1)	7324(1)	20(1)
Te(3)	7440(1)	8395(1)	7494(1)	22(1)
Te(4)	5652(1)	3072(1)	5162(1)	21(1)
Te(5)	2466(1)	1487(1)	5057(1)	23(1)
Te(6)	2094(1)	3113(1)	4255(1)	20(1)
Cl(1)	10358(2)	6795(1)	8340(1)	41(1)
Cl(2)	7341(2)	6593(1)	8895(1)	41(1)
Cl(3)	7669(2)	5579(1)	8129(1)	34(1)
Cl(4)	4365(2)	6683(1)	8119(1)	32(1)
Cl(5)	4402(2)	5604(1)	7285(1)	34(1)
Cl(6)	1482(2)	6768(1)	7317(1)	34(1)
Cl(7)	4057(2)	6874(1)	6650(1)	36(1)
Cl(8)	4198(2)	8183(1)	7414(1)	33(1)
Cl(9)	7302(2)	8605(1)	6822(1)	42(1)
Cl(10)	7044(2)	9523(1)	7632(1)	35(1)
Cl(11)	7538(2)	8173(1)	8265(1)	38(1)

Cl(12)	180(2)	8518(1)	7558(1)	42(1)
Cl(13)	7628(2)	6920(1)	7415(1)	31(1)
Cl(14)	5601(2)	4263(1)	5177(1)	41(1)
Cl(15)	8345(2)	3041(1)	5202(1)	41(1)
Cl(16)	5558(2)	3033(1)	5826(1)	38(1)
Cl(17)	5689(2)	1688(1)	5118(1)	33(1)
Cl(18)	2726(2)	1451(1)	5730(1)	39(1)
Cl(19)	2965(2)	337(1)	4996(1)	34(1)
Cl(20)	-256(2)	1332(1)	5033(1)	36(1)
Cl(21)	5325(2)	3128(1)	4338(1)	31(1)
Cl(22)	2206(2)	4295(1)	4338(1)	37(1)
Cl(23)	2055(2)	3179(1)	3591(1)	37(1)
Cl(24)	-669(2)	3149(1)	4224(1)	32(1)
Cl(25)	2055(2)	1715(1)	4240(1)	33(1)
Cl(26)	2223(2)	2931(1)	5092(1)	28(1)
O(1L)	1666(5)	9876(2)	6425(1)	28(1)
O(2L)	3159(4)	8956(2)	6189(1)	28(1)
O(3L)	7013(5)	5305(2)	4043(1)	39(1)
O(4L)	8357(7)	5860(2)	3554(1)	49(1)
C(1L)	3377(8)	9918(3)	7014(2)	42(2)
C(2L)	1719(7)	9887(3)	6849(2)	36(2)
C(3L)	135(8)	10009(4)	6235(2)	41(2)
C(4L)	131(8)	9930(4)	5810(2)	41(2)
C(5L)	1382(7)	8211(3)	6469(2)	35(2)
C(6L)	2327(8)	8311(3)	6136(2)	34(2)
C(7L)	4099(7)	9122(3)	5877(2)	38(2)
C(8L)	5065(7)	9738(4)	5989(2)	44(2)
C(9L)	9329(10)	5495(4)	4492(2)	63(2)
C(10L)	8061(9)	4997(4)	4351(2)	55(2)
C(11L)	5742(9)	4858(4)	3897(3)	57(2)
C(12L)	4594(9)	5238(4)	3628(2)	61(2)
C(13L)	9440(8)	4825(4)	3351(2)	46(2)
C(14L)	8922(12)	5510(4)	3262(3)	85(3)
C(15L)	7959(9)	6567(3)	3496(2)	46(2)
C(16L)	8635(10)	6968(3)	3827(2)	51(2)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $[\text{H}(\text{OC}_4\text{H}_{10})_2][\text{Te}_3\text{Cl}_{13}]$.

Te(1)-Cl(2)	2.326(2)
Te(1)-Cl(3)	2.341(2)
Te(1)-Cl(1)	2.354(2)
Te(1)-Cl(4)	2.793(2)
Te(2)-Cl(6)	2.319(2)
Te(2)-Cl(7)	2.352(2)
Te(2)-Cl(5)	2.371(2)
Te(2)-Cl(4)	2.774(2)
Te(2)-Cl(8)	2.800(2)
Te(3)-Cl(10)	2.332(2)
Te(3)-Cl(12)#1	2.361(2)
Te(3)-Cl(9)	2.375(2)
Te(3)-Cl(11)	2.723(2)
Te(3)-Cl(8)	2.810(2)
Te(4)-Cl(15)	2.311(2)
Te(4)-Cl(16)	2.332(2)
Te(4)-Cl(14)	2.375(2)
Te(4)-Cl(17)	2.764(2)
Te(5)-Cl(18)	2.341(2)
Te(5)-Cl(19)	2.346(2)

Te(5)-Cl(20)	2.358(2)
Te(5)-Cl(17)	2.792(2)
Te(6)-Cl(23)	2.321(2)
Te(6)-Cl(24)	2.372(2)
Te(6)-Cl(22)	2.374(2)
Te(6)-Cl(21)	2.769(2)
Te(6)-Cl(25)	2.786(2)
Cl(12)-Te(3)#2	2.361(2)
O(1L)-C(3L)	1.440(7)
O(1L)-C(2L)	1.476(7)
O(2L)-C(7L)	1.461(7)
O(2L)-C(6L)	1.474(7)
O(3L)-C(11L)	1.462(9)
O(3L)-C(10L)	1.469(8)
O(4L)-C(14L)	1.367(8)
O(4L)-C(15L)	1.458(8)
C(1L)-C(2L)	1.486(9)
C(3L)-C(4L)	1.493(9)
C(5L)-C(6L)	1.499(8)
C(7L)-C(8L)	1.512(9)
C(9L)-C(10L)	1.522(11)
C(11L)-C(12L)	1.498(11)
C(13L)-C(14L)	1.461(10)
C(15L)-C(16L)	1.475(10)

Cl(2)-Te(1)-Cl(3)	93.14(6)
Cl(2)-Te(1)-Cl(1)	93.97(6)
Cl(3)-Te(1)-Cl(1)	92.12(6)
Cl(2)-Te(1)-Cl(4)	87.05(6)
Cl(3)-Te(1)-Cl(4)	88.41(5)
Cl(1)-Te(1)-Cl(4)	178.82(6)
Cl(6)-Te(2)-Cl(7)	92.88(6)
Cl(6)-Te(2)-Cl(5)	94.07(6)
Cl(7)-Te(2)-Cl(5)	90.66(6)
Cl(6)-Te(2)-Cl(4)	87.98(5)
Cl(7)-Te(2)-Cl(4)	179.14(5)
Cl(5)-Te(2)-Cl(4)	89.19(5)
Cl(6)-Te(2)-Cl(8)	90.73(5)
Cl(7)-Te(2)-Cl(8)	92.20(5)
Cl(5)-Te(2)-Cl(8)	174.28(5)
Cl(4)-Te(2)-Cl(8)	87.86(5)
Cl(10)-Te(3)-Cl(12)#1	92.67(6)
Cl(10)-Te(3)-Cl(9)	92.40(6)
Cl(12)#1-Te(3)-Cl(9)	91.37(6)
Cl(10)-Te(3)-Cl(11)	86.66(5)
Cl(12)#1-Te(3)-Cl(11)	89.61(6)
Cl(9)-Te(3)-Cl(11)	178.67(6)
Cl(10)-Te(3)-Cl(8)	90.05(5)
Cl(12)#1-Te(3)-Cl(8)	177.26(6)
Cl(9)-Te(3)-Cl(8)	88.85(6)
Cl(11)-Te(3)-Cl(8)	90.21(5)
Cl(15)-Te(4)-Cl(16)	94.37(7)
Cl(15)-Te(4)-Cl(14)	92.68(6)
Cl(16)-Te(4)-Cl(14)	90.57(6)
Cl(15)-Te(4)-Cl(17)	87.63(5)
Cl(16)-Te(4)-Cl(17)	91.39(5)
Cl(14)-Te(4)-Cl(17)	177.99(6)
Cl(18)-Te(5)-Cl(19)	93.47(6)
Cl(18)-Te(5)-Cl(20)	91.41(6)
Cl(19)-Te(5)-Cl(20)	93.44(6)
Cl(18)-Te(5)-Cl(17)	86.31(6)
Cl(19)-Te(5)-Cl(17)	87.53(5)

Cl(20)-Te(5)-Cl(17)	177.57(5)
Cl(23)-Te(6)-Cl(24)	92.34(6)
Cl(23)-Te(6)-Cl(22)	93.59(6)
Cl(24)-Te(6)-Cl(22)	90.23(5)
Cl(23)-Te(6)-Cl(21)	90.94(5)
Cl(24)-Te(6)-Cl(21)	175.86(5)
Cl(22)-Te(6)-Cl(21)	87.04(5)
Cl(23)-Te(6)-Cl(25)	92.26(6)
Cl(24)-Te(6)-Cl(25)	91.10(5)
Cl(22)-Te(6)-Cl(25)	173.94(6)
Cl(21)-Te(6)-Cl(25)	91.30(5)
Te(2)-Cl(4)-Te(1)	96.34(5)
Te(2)-Cl(8)-Te(3)	98.96(5)
Te(4)-Cl(17)-Te(5)	97.48(5)
C(3L)-O(1L)-C(2L)	113.1(4)
C(7L)-O(2L)-C(6L)	113.8(4)
C(11L)-O(3L)-C(10L)	112.5(5)
C(14L)-O(4L)-C(15L)	119.1(5)
O(1L)-C(2L)-C(1L)	108.6(5)
O(1L)-C(3L)-C(4L)	110.4(5)
O(2L)-C(6L)-C(5L)	108.3(5)
O(2L)-C(7L)-C(8L)	108.8(5)
O(3L)-C(10L)-C(9L)	109.4(6)
O(3L)-C(11L)-C(12L)	109.5(6)
O(4L)-C(14L)-C(13L)	116.1(7)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

#1 x+1,y,z #2 x-1,y,z

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{H}(\text{OC}_4\text{H}_{10})_2][\text{Te}_3\text{Cl}_{13}]$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	23(1)	25(1)	20(1)	1(1)	0(1)	-4(1)
Te(2)	17(1)	24(1)	21(1)	-1(1)	2(1)	0(1)
Te(3)	21(1)	25(1)	22(1)	4(1)	3(1)	-1(1)
Te(4)	19(1)	22(1)	21(1)	-1(1)	1(1)	1(1)
Te(5)	24(1)	21(1)	22(1)	0(1)	1(1)	1(1)
Te(6)	18(1)	22(1)	21(1)	0(1)	2(1)	2(1)
Cl(1)	23(1)	57(1)	40(1)	4(1)	-5(1)	-9(1)
Cl(2)	54(1)	49(1)	20(1)	0(1)	3(1)	-20(1)
Cl(3)	36(1)	25(1)	39(1)	-2(1)	2(1)	3(1)
Cl(4)	28(1)	38(1)	30(1)	-2(1)	9(1)	0(1)
Cl(5)	40(1)	25(1)	35(1)	-3(1)	3(1)	3(1)
Cl(6)	17(1)	43(1)	42(1)	-4(1)	5(1)	0(1)
Cl(7)	42(1)	43(1)	23(1)	3(1)	6(1)	10(1)
Cl(8)	27(1)	34(1)	37(1)	-2(1)	2(1)	5(1)
Cl(9)	47(1)	56(1)	25(1)	8(1)	8(1)	5(1)
Cl(10)	41(1)	26(1)	37(1)	4(1)	5(1)	0(1)
Cl(11)	56(1)	31(1)	25(1)	-2(1)	-1(1)	-6(1)
Cl(12)	21(1)	53(1)	52(1)	8(1)	3(1)	-2(1)
Cl(13)	24(1)	39(1)	30(1)	-1(1)	7(1)	4(1)
Cl(14)	56(1)	21(1)	47(1)	3(1)	8(1)	3(1)
Cl(15)	19(1)	49(1)	54(1)	-9(1)	1(1)	-1(1)
Cl(16)	54(1)	38(1)	20(1)	-1(1)	2(1)	9(1)
Cl(17)	27(1)	33(1)	39(1)	-2(1)	0(1)	7(1)
Cl(18)	54(1)	37(1)	23(1)	0(1)	2(1)	1(1)
Cl(19)	41(1)	25(1)	34(1)	-2(1)	1(1)	5(1)

Cl(20)	25(1)	41(1)	43(1)	-2(1)	7(1)	-1(1)
Cl(21)	26(1)	42(1)	27(1)	2(1)	9(1)	3(1)
Cl(22)	31(1)	23(1)	57(1)	-1(1)	6(1)	0(1)
Cl(23)	35(1)	54(1)	23(1)	4(1)	5(1)	3(1)
Cl(24)	20(1)	33(1)	42(1)	-6(1)	4(1)	1(1)
Cl(25)	34(1)	33(1)	32(1)	-8(1)	2(1)	2(1)
Cl(26)	23(1)	34(1)	28(1)	-5(1)	5(1)	6(1)
O(1L)	27(2)	31(3)	26(2)	-4(2)	3(2)	9(2)
O(2L)	28(2)	30(2)	26(2)	-4(2)	5(2)	5(2)
O(3L)	49(3)	27(3)	42(3)	7(2)	15(2)	9(2)
O(4L)	91(4)	26(3)	36(3)	3(2)	30(3)	-1(3)
C(1L)	47(4)	38(4)	39(4)	-6(3)	-3(3)	6(3)
C(2L)	40(4)	41(4)	27(4)	-6(3)	6(3)	8(3)
C(3L)	38(4)	44(4)	39(4)	2(3)	-4(3)	22(3)
C(4L)	40(4)	39(4)	40(4)	6(3)	-9(3)	-5(3)
C(5L)	41(4)	29(4)	34(4)	4(3)	-2(3)	3(3)
C(6L)	50(4)	20(3)	31(4)	-8(3)	-3(3)	7(3)
C(7L)	36(4)	48(4)	34(4)	-4(3)	15(3)	5(3)
C(8L)	32(4)	61(5)	42(4)	9(4)	15(3)	-3(3)
C(9L)	77(6)	58(6)	52(5)	-6(4)	-4(5)	24(5)
C(10L)	65(5)	52(5)	51(5)	27(4)	20(4)	27(4)
C(11L)	63(5)	27(4)	88(6)	5(4)	42(5)	3(4)
C(12L)	58(5)	54(5)	69(6)	-11(5)	4(4)	-5(4)
C(13L)	50(4)	44(4)	46(4)	-6(4)	11(4)	2(4)
C(14L)	122(8)	58(6)	89(7)	22(5)	79(7)	36(6)
C(15L)	67(5)	33(4)	37(4)	7(3)	6(4)	-3(4)
C(16L)	90(6)	30(4)	37(4)	0(3)	14(4)	-5(4)

6.1.19. TeBr₄-dioxan

Bezeichnung	tebr	
Summenformel	C ₄ H ₈ Br ₄ O ₂ Te	
Molmasse	535.34 g/mol	
Messtemperatur	293(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	P2 ₁ /c	
Zelldimensionen	a = 7.289(3) Å	α = 90°.
	b = 11.995(4) Å	β = 102.831(8)°.
	c = 13.651(5) Å	γ = 90°.
Volumen	1163.7(7) Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	3.056 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	16.251 mm ⁻¹	
F(000)	960	
Kristalldimensionen	0.2 x 0.09 x 0.04 mm ³	
Theta-Bereich der Datensammlung	2.29 bis 28.31°.	
Bereich der Indizes	-9<=h<=9, -14<=k<=16, -18<=l<=16	
Anzahl gemessene Reflexe	11829	
unabhängige Reflexe	2875 [R(int) = 0.0386]	
Vollständigkeit zu Theta = 28.31°	99.1 %	
Absorptionskorrektur	empirisch	
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.336	
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²	

Reflexe / restraints / Parameter	2875 / 0 / 100
Goodness-of-fit gegen F^2	1.150
Endgültiger Fehler R [$>2\sigma(I)$]	$R_1 = 0.0623$, $wR_2 = 0.1836$
R (alle Daten)	$R_1 = 0.0714$, $wR_2 = 0.1896$
Größte und kleinste Restelektronendichte	6.973 und -1.787 e.Å ⁻³

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und äquivalente isotrope Temperaturfaktoren (Å² $\times 10^3$) für TeBr₄-dioxan. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	7420(1)	2400(1)	1091(1)	14(1)
Br(1)	4662(2)	2565(1)	-524(1)	28(1)
Br(2)	10441(2)	2129(1)	2591(1)	26(1)
Br(3)	6242(2)	3981(1)	1976(1)	33(1)
Br(4)	5616(2)	979(1)	1809(1)	33(1)
O(1L)	9182(10)	4020(6)	299(6)	22(2)
O(2L)	8711(11)	724(6)	302(6)	21(2)
C(1L)	10951(17)	4451(11)	856(10)	34(3)
C(2L)	8062(16)	4949(11)	-152(13)	43(4)
C(3L)	9272(17)	-293(9)	819(9)	25(2)
C(4L)	10245(18)	1139(8)	-125(9)	25(2)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für TeBr₄-dioxan.

Te(1)-Br(4)	2.482(2)
Te(1)-Br(3)	2.501(2)
Te(1)-O(2L)	2.557(8)
Te(1)-Br(1)	2.641(2)
Te(1)-Br(2)	2.673(2)
Te(1)-O(1L)	2.686(7)
O(1L)-C(2L)	1.437(13)
O(1L)-C(1L)	1.439(13)
O(2L)-C(3L)	1.423(13)
O(2L)-C(4L)	1.458(13)
C(1L)-C(2L)#1	1.505(19)
C(2L)-C(1L)#1	1.505(19)
C(3L)-C(4L)#2	1.482(15)
C(4L)-C(3L)#2	1.482(15)
Br(4)-Te(1)-Br(3)	93.51(6)
Br(4)-Te(1)-O(2L)	84.46(17)
Br(3)-Te(1)-O(2L)	176.18(18)
Br(4)-Te(1)-Br(1)	90.51(5)
Br(3)-Te(1)-Br(1)	93.82(5)
O(2L)-Te(1)-Br(1)	89.44(18)
Br(4)-Te(1)-Br(2)	91.89(5)
Br(3)-Te(1)-Br(2)	92.03(5)
O(2L)-Te(1)-Br(2)	84.81(18)
Br(1)-Te(1)-Br(2)	173.53(5)
Br(4)-Te(1)-O(1L)	176.40(16)
Br(3)-Te(1)-O(1L)	83.78(19)
O(2L)-Te(1)-O(1L)	98.4(2)
Br(1)-Te(1)-O(1L)	87.31(16)

Br(2)-Te(1)-O(1L)	90.57(16)
C(2L)-O(1L)-C(1L)	107.7(9)
C(2L)-O(1L)-Te(1)	117.2(6)
C(1L)-O(1L)-Te(1)	120.0(7)
C(3L)-O(2L)-C(4L)	109.2(8)
C(3L)-O(2L)-Te(1)	123.9(6)
C(4L)-O(2L)-Te(1)	106.7(6)
O(1L)-C(1L)-C(2L)#1	109.5(11)
O(1L)-C(2L)-C(1L)#1	109.7(10)
O(2L)-C(3L)-C(4L)#2	110.6(9)
O(2L)-C(4L)-C(3L)#2	109.5(9)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:
 #1 -x+2,-y+1,-z #2 -x+2,-y,-z

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für TeBr_4 -dioxan.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	14(1)	11(1)	17(1)	0(1)	2(1)	1(1)
Br(1)	24(1)	28(1)	28(1)	2(1)	-7(1)	-2(1)
Br(2)	25(1)	27(1)	22(1)	-1(1)	-6(1)	4(1)
Br(3)	32(1)	32(1)	33(1)	-12(1)	4(1)	14(1)
Br(4)	27(1)	33(1)	40(1)	14(1)	12(1)	-4(1)
O(1L)	15(3)	12(3)	34(4)	7(3)	-5(3)	-2(3)
O(2L)	22(4)	15(3)	27(4)	0(3)	7(3)	-4(3)
C(1L)	25(6)	28(6)	41(7)	6(5)	-12(5)	-6(5)
C(2L)	16(5)	25(6)	84(11)	30(7)	4(6)	0(4)
C(3L)	37(6)	10(4)	31(6)	2(4)	15(5)	3(4)
C(4L)	41(6)	10(4)	30(6)	8(4)	17(5)	0(4)

6.1.20. $[\text{H}_3\text{O}(\text{dioxan})_3] \cdot [\text{Te}_3\text{Br}_{13}]$

Bezeichnung	bm10b	
Summenformel	$\text{C}_{12} \text{H}_{27} \text{Br}_{13} \text{O}_7 \text{Te}_3$	
Molmasse	1704.97 g/mol	
Messtemperatur	123(2) K	
Wellenlänge	0.71073 Å	
Kristallsystem	monoklin	
Raumgruppe	$P2_1/n$	
Zelldimensionen	$a = 12.218(4)$ Å	$\alpha = 90^\circ$.
	$b = 16.075(5)$ Å	$\beta = 102.742(8)^\circ$.
	$c = 19.855(6)$ Å	$\gamma = 90^\circ$.
Volumen	$3804(2)$ Å ³	
Z	4	
Dichte (berechnet)	2.977 Mg/m ³	
Absorptionskoeffizient	15.970 mm ⁻¹	
F(000)	3064	
Kristalldimensionen	0.29 x 0.20 x 0.15 mm ³	

Theta-Bereich der Datensammlung	1.65 bis 30.66°
Bereich der Indizes	-17<=h<=15, -23<=k<=22, -28<=l<=20
Anzahl gemessene Reflexe	60195
unabhängige Reflexe	11583 [R(int) = 0.0609]
Vollständigkeit zu Theta = 30.66°	98.5 %
Absorptionskorrektur	empirisch
Max. und Min. Transmission	1.000 und 0.065
Methode der Strukturverfeinerung	Full-matrix least-squares on F ²
Reflexe / restraints / Parameter	11583 / 3 / 328
Goodness-of-fit gegen F ²	1.024
Endgültiger Fehler R [$l > 2\sigma(l)$]	R ₁ = 0.0336, wR ₂ = 0.0713
R (alle Daten)	R ₁ = 0.0672, wR ₂ = 0.0832
Größte und kleinste Restelektronendichte	1.256 und -2.458 e.Å ⁻³

Atomkoordinaten ($\times 10^4$) und equivalente isotrope Temperaturfaktoren ($\text{Å}^2 \times 10^3$) für $[\text{H}_3\text{O}(\text{dioxan})_3] \cdot [\text{Te}_3\text{Br}_{13}]$. U(eq) ist definiert als 1/3 des orthogonalisierten U_{ij} Tensors.

	x	y	z	U(eq)
Te(1)	7677(1)	8810(1)	320(1)	6(1)
Te(2)	9251(1)	7469(1)	2156(1)	5(1)
Te(3)	7697(1)	6072(1)	310(1)	6(1)
Br(1)	6954(1)	7436(1)	1203(1)	8(1)
Br(2)	8451(1)	9808(1)	-416(1)	14(1)
Br(3)	5763(1)	6040(1)	-467(1)	17(1)
Br(4)	8459(1)	8568(1)	2842(1)	13(1)
Br(5)	8320(1)	7452(1)	-501(1)	9(1)
Br(6)	5745(1)	8761(1)	-453(1)	16(1)
Br(7)	8491(1)	5067(1)	-405(1)	14(1)
Br(8)	8622(1)	6302(1)	2848(1)	13(1)
Br(9)	11161(1)	7538(1)	2936(1)	14(1)
Br(10)	9929(1)	6242(1)	1260(1)	10(1)
Br(11)	9903(1)	8758(1)	1286(1)	10(1)
Br(12)	7233(1)	4944(1)	1093(1)	17(1)
Br(13)	7113(1)	9939(1)	1065(1)	17(1)
O(1)	1624(3)	2617(2)	4152(2)	17(1)
O(2)	2949(3)	2382(2)	5491(2)	16(1)
O(3)	4958(3)	3939(2)	7010(2)	16(1)
O(4)	6479(3)	4151(2)	8291(2)	18(1)
O(5)	5185(3)	1494(2)	7324(2)	16(1)
O(6)	6519(3)	109(2)	7838(2)	23(1)
O(7)	3909(3)	2610(2)	6734(2)	16(1)
C(1)	1181(4)	2228(3)	4683(3)	20(1)
C(2)	1768(4)	2549(3)	5376(3)	21(1)
C(3)	2784(4)	2434(3)	4265(3)	22(1)
C(4)	3417(4)	2748(3)	4947(3)	23(1)
C(5)	6148(4)	3951(3)	7060(3)	18(1)
C(6)	6768(4)	3658(3)	7753(3)	19(1)
C(7)	5307(4)	4113(3)	8248(3)	14(1)
C(8)	4672(4)	4426(3)	7554(3)	16(1)
C(9)	4878(5)	940(3)	7819(3)	25(1)
C(10)	5913(5)	546(3)	8252(3)	25(1)
C(11)	5819(5)	1058(3)	6907(3)	25(1)
C(12)	6822(5)	657(4)	7349(3)	34(2)

Bindungslängen [Å] und Winkel [°] für $[\text{H}_3\text{O}(\text{dioxan})_3]\cdot[\text{Te}_3\text{Br}_{13}]$.

Te(1)-Br(2)	2.4915(7)
Te(1)-Br(6)	2.5172(8)
Te(1)-Br(13)	2.5313(7)
Te(1)-Br(5)	2.9344(8)
Te(1)-Br(11)	2.9638(9)
Te(2)-Br(9)	2.5015(8)
Te(2)-Br(8)	2.5422(7)
Te(2)-Br(4)	2.5487(7)
Te(2)-Br(10)	2.8976(8)
Te(2)-Br(11)	2.9193(8)
Te(3)-Br(7)	2.4824(7)
Te(3)-Br(3)	2.5218(8)
Te(3)-Br(12)	2.5332(8)
Te(3)-Br(5)	2.9381(8)
Te(3)-Br(10)	2.9665(9)
O(1)-C(3)	1.417(6)
O(1)-C(1)	1.431(6)
O(2)-C(2)	1.436(6)
O(2)-C(4)	1.453(6)
O(3)-C(5)	1.435(6)
O(3)-C(8)	1.439(6)
O(4)-C(7)	1.417(6)
O(4)-C(6)	1.435(6)
O(5)-C(11)	1.435(6)
O(5)-C(9)	1.436(6)
O(6)-C(10)	1.409(6)
O(6)-C(12)	1.418(7)
C(1)-C(2)	1.497(7)
C(3)-C(4)	1.492(7)
C(5)-C(6)	1.493(7)
C(7)-C(8)	1.511(7)
C(9)-C(10)	1.503(7)
C(11)-C(12)	1.487(8)
Br(2)-Te(1)-Br(6)	95.13(3)
Br(2)-Te(1)-Br(13)	93.95(3)
Br(6)-Te(1)-Br(13)	92.22(2)
Br(2)-Te(1)-Br(5)	88.33(3)
Br(6)-Te(1)-Br(5)	88.18(2)
Br(13)-Te(1)-Br(5)	177.632(19)
Br(2)-Te(1)-Br(11)	89.14(2)
Br(6)-Te(1)-Br(11)	175.634(18)
Br(13)-Te(1)-Br(11)	88.36(2)
Br(5)-Te(1)-Br(11)	91.06(2)
Br(9)-Te(2)-Br(8)	92.89(2)
Br(9)-Te(2)-Br(4)	92.94(2)
Br(8)-Te(2)-Br(4)	91.54(3)
Br(9)-Te(2)-Br(10)	93.21(2)
Br(8)-Te(2)-Br(10)	89.53(3)
Br(4)-Te(2)-Br(10)	173.695(18)
Br(9)-Te(2)-Br(11)	89.74(2)
Br(8)-Te(2)-Br(11)	176.559(17)
Br(4)-Te(2)-Br(11)	90.54(3)
Br(10)-Te(2)-Br(11)	88.10(3)
Br(7)-Te(3)-Br(3)	93.98(3)
Br(7)-Te(3)-Br(12)	93.09(3)
Br(3)-Te(3)-Br(12)	93.12(2)
Br(7)-Te(3)-Br(5)	89.84(3)
Br(3)-Te(3)-Br(5)	90.06(2)
Br(12)-Te(3)-Br(5)	175.520(18)

Br(7)-Te(3)-Br(10)	90.18(2)
Br(3)-Te(3)-Br(10)	175.427(18)
Br(12)-Te(3)-Br(10)	88.56(2)
Br(5)-Te(3)-Br(10)	88.04(2)
Te(1)-Br(5)-Te(3)	97.14(3)
Te(2)-Br(10)-Te(3)	96.10(2)
Te(2)-Br(11)-Te(1)	94.13(2)
C(3)-O(1)-C(1)	108.7(4)
C(2)-O(2)-C(4)	110.6(4)
C(5)-O(3)-C(8)	110.6(4)
C(7)-O(4)-C(6)	110.0(4)
C(11)-O(5)-C(9)	110.4(4)
C(10)-O(6)-C(12)	109.9(4)
O(1)-C(1)-C(2)	110.2(4)
O(2)-C(2)-C(1)	110.0(4)
O(1)-C(3)-C(4)	111.9(4)
O(2)-C(4)-C(3)	109.2(4)
O(3)-C(5)-C(6)	111.1(4)
O(4)-C(6)-C(5)	110.7(4)
O(4)-C(7)-C(8)	110.5(4)
O(3)-C(8)-C(7)	110.0(4)
O(5)-C(9)-C(10)	109.8(4)
O(6)-C(10)-C(9)	111.1(5)
O(5)-C(11)-C(12)	110.5(5)
O(6)-C(12)-C(11)	111.6(5)

Verwendete Symmetrietransformationen zur Generierung äquivalenter Atome:

Anisotrope Temperaturfaktoren ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) für $[\text{H}_3\text{O}(\text{dioxan})_3] \cdot [\text{Te}_3\text{Br}_{13}]$.

Der anisotrope Temperaturfaktor hat die Form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U_{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U_{12}]$

	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Te(1)	6(1)	6(1)	6(1)	0(1)	0(1)	1(1)
Te(2)	5(1)	6(1)	4(1)	0(1)	0(1)	0(1)
Te(3)	6(1)	6(1)	6(1)	-1(1)	1(1)	-1(1)
Br(1)	5(1)	11(1)	8(1)	0(1)	1(1)	0(1)
Br(2)	18(1)	12(1)	12(1)	4(1)	3(1)	-4(1)
Br(3)	8(1)	22(1)	18(1)	-4(1)	-5(1)	0(1)
Br(4)	17(1)	11(1)	12(1)	-4(1)	7(1)	1(1)
Br(5)	11(1)	10(1)	8(1)	0(1)	2(1)	0(1)
Br(6)	9(1)	20(1)	17(1)	5(1)	-5(1)	0(1)
Br(7)	16(1)	13(1)	14(1)	-5(1)	5(1)	2(1)
Br(8)	16(1)	11(1)	12(1)	4(1)	4(1)	-2(1)
Br(9)	8(1)	21(1)	12(1)	-1(1)	-4(1)	-1(1)
Br(10)	7(1)	12(1)	11(1)	-3(1)	1(1)	2(1)
Br(11)	8(1)	11(1)	10(1)	1(1)	1(1)	-1(1)
Br(12)	20(1)	15(1)	18(1)	5(1)	7(1)	-5(1)
Br(13)	20(1)	15(1)	17(1)	-5(1)	6(1)	7(1)
O(1)	12(2)	25(2)	13(2)	3(1)	1(1)	4(1)
O(2)	8(2)	25(2)	14(2)	-1(1)	-2(1)	-3(1)
O(3)	15(2)	15(2)	13(2)	-3(1)	-3(2)	0(1)
O(4)	11(2)	24(2)	15(2)	-6(1)	-2(2)	0(1)
O(5)	19(2)	16(2)	13(2)	7(1)	7(2)	6(1)
O(6)	32(2)	16(2)	21(2)	7(1)	8(2)	10(2)
O(7)	12(2)	15(2)	17(2)	0(1)	-4(2)	1(1)
C(1)	9(3)	35(3)	12(2)	-2(2)	-3(2)	-2(2)

C(2)	6(2)	41(3)	14(2)	-5(2)	0(2)	3(2)
C(3)	13(3)	31(3)	21(3)	1(2)	4(2)	-2(2)
C(4)	8(3)	28(3)	32(3)	3(2)	2(2)	-7(2)
C(5)	18(3)	23(2)	16(3)	-3(2)	8(2)	-8(2)
C(6)	13(3)	22(2)	20(3)	-7(2)	5(2)	1(2)
C(7)	14(3)	16(2)	14(3)	-7(2)	6(2)	-1(2)
C(8)	16(3)	13(2)	19(3)	-7(2)	2(2)	4(2)
C(9)	25(3)	32(3)	24(3)	17(2)	17(3)	11(2)
C(10)	32(4)	29(3)	17(3)	10(2)	8(3)	9(2)
C(11)	36(4)	24(3)	19(3)	9(2)	14(3)	14(2)
C(12)	29(4)	40(3)	37(4)	17(3)	19(3)	17(3)
